

КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ
КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
КАФЕДРА ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Р.Г. Деминов, Б.И. Кочелаев, Л.Р. Тагиров

МЕТОДЫ
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ
В ФИЗИКЕ
КОНДЕНСИРОВАННОГО
СОСТОЯНИЯ
КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ

Казань – 2018

УДК 530.145(075.8)

ББК 22.31

Д30

*Принято на заседании кафедры теоретической физики
Протокол № 5 от 11 апреля 2018 года*

*Принято на заседании кафедры физики твердого тела
Протокол № 5 от 9 апреля 2018 года*

Рецензент –

доктор физико-математических наук, профессор
А.П. Кирпичников

Деминов Р.Г.

Д30 Методы квантовой теории поля в физике конденсированного состояния. Конспект лекций / Р.Г. Деминов, Б.И. Кочелаев, Л.Р. Тагиров. – Казань: Казан. ун-т, 2018. – 92 с.

В пособии изложены методы современной теории конденсированного состояния. Основное внимание уделено диаграммному методу в проблеме многих частиц.

Предназначено для магистрантов Института физики, специализирующихся в области теоретической физики, физики конденсированного состояния, сложных систем и низких температур.

Данные лекции не являются оригинальными и полностью основаны на известных фундаментальных учебниках и монографиях [1-6]. Авторам принадлежит только отбор материала.

© Деминов Р.Г., Кочелаев Б.И., Тагиров Л.Р., 2018

© Казанский университет, 2018

Оглавление

1	Основные принципы	5
1.1	Пропагаторы	5
1.2	Интегралы по траектории (функциональные интегралы)	9
1.3	Теория возмущений для пропагатора	16
2	Функции Грина при $T = 0$	27
2.1	Определение функций Грина многочастичной системы	27
2.1.1	Невозмущенные функции Грина	34
2.2	Аналитические свойства функций Грина	35
2.3	Запаздывающая и опережающая функции Грина	40
2.3.1	Возбуждения квазичастиц, запаздывающие и опережающие функции Грина	41
2.3.2	Соотношения Крамерса-Кронига	43
2.3.3	Функция Грина и наблюдаемые	44
2.4	Теория возмущений: диаграммы Фейнмана	45
2.4.1	Правила Фейнмана. Теоремы Вика и сокращения	45
2.5	Операции с диаграммами. Собственно- энергетическая функция. Уравнение Дайсона	56
2.6	Перенормировка взаимодействия. Поляризационный оператор	61
2.6.1	Экранирование кулоновского взаимодействия	62
2.7	Самосогласованная теория возмущений	66
2.8	Многочастичные функции Грина. Вершинная функция	66
3	Методы квантовой теории поля при конечных температурах	75
3.1	Аналитические свойства равновесных функций Грина	75
3.1.1	Статистический оператор (матрица плотности). Уравнение Ливилля	75
3.1.2	Определение и аналитические свойства равновесных функций Грина	77
3.2	Формализм Мацубары	81
3.2.1	Уравнение Блоха	81
3.2.2	Температурные (мацубаровские) функции Грина	83
3.2.3	Диаграммная техника для температурных функций Грина	85
4	Литература	91

Глава 1

Основные принципы

1.1 Пропагаторы

Введение квазичастиц едва ли было бы достижением, если для каждой новой задачи было бы необходимо разрабатывать полностью новый метод. К счастью, в общем математическом аппарате, основанном на функциях Грина и фейнмановских диаграммах, учитываются все детали, и, таким образом, квазичастичный подход становится очень эффективным. Фактически этот аппарат работает настолько превосходно, что его часто применяют к задачам, которые могут быть более легко решены другими методами. И, как в случае с любым эффективным инструментом, иногда забывают о его естественных ограничениях. Но сам по себе этот подход - редкий пример математической красоты, физического понимания и практической эффективности. Этот метод происходит из квантовой теории поля и, следовательно, предназначен для работы с системой с бесконечным числом степеней свободы. Это точно то, в чем нуждается теория конденсированного состояния. Кроме того, обычно в задачах теории конденсированного состояния не интересуются релятивистской ковариантностью, что упрощает необходимый аппарат и облегчает решение задач. С другой стороны, огромное богатство эффектов в физике твердого тела уже обеспечивает намного более широкую область для полевых теоретиков, чем "стандартная" теория поля.

Как уже было сказано, лучше не использовать функции Грина и фейнмановские диаграммы там, где могут быть применены более простые методы. Однако, начнем рассмотрение со случая одной квантовой частицы. Таким образом возможно получить все общие выражения, которые фактически не зависят от числа частиц в системе, чтобы увидеть ясно структуру теории и понять, где многочастичные свойства действительно входят в картину явления.

Известно, что вероятность наблюдения отдельной квантовой частицы в точке x в момент времени t определяется квадратом модуля волновой функции этой частицы в этом месте и в этот момент времени, $|\Psi(x, t)|^2$. Чтобы найти $\Psi(x, t)$ необходимо решить уравнение Шредингера, учитывая начальные и граничные условия. Но многие свойства решения могут быть получены непосредственно из общих принципов.

Во-первых, из принципа суперпозиции. Математически это означает, что $\Psi(x, t)$ удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению. Физически это означает, что волновые функции удовлетворяют принципу Гюйгенса, согласно которому каждая точка волнового фронта действует как вторичный излучатель. Это позволяет

записать для волновой функции в некоторый момент времени t

$$\Psi(x, t) = \int dx' K(x, t; x', t') \Psi(x', t'), \quad t > t'. \quad (1.1)$$

Ядро (kernel) $K(x, t; x', t')$ описывает распространение Ψ - волны от (x', t') к (x, t) и поэтому называется функцией распространения или *пропагатором*. Это понятие является фундаментом всей теории. Отметим, что вследствие принципа причинности

$$K(x, t; x', t') = 0, \quad t < t', \quad (1.2)$$

так что будущее не воздействует на прошлое.

Сейчас предположим, что частица в начальный момент строго локализована: $\Psi(x', t') = \delta(x' - x_0)$. Тогда из (1.1) следует

$$\Psi(x, t) = K(x, t; x', t'). \quad (1.3)$$

Это означает, что пропагатор представляет собой амплитуду перехода частицы из точки (x', t') точку (x, t) , а квадрат его модуля дает вероятность перехода.

В (1.1) момент времени t' не конкретизирован, за исключением того, что он должен предшествовать моменту времени наблюдения t . Тогда для некоторого $t'' > t'$ получаем

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \int dx'' K(x, t; x'', t'') \Psi(x'', t'') \\ &= \int dx'' \int dx' K(x, t; x'', t'') K(x'', t''; x', t') \Psi(x', t'). \end{aligned} \quad (1.4)$$

Так как оба выражения должны быть одинаковыми, то для $t > t'' > t'$ получаем

$$K(x, t; x', t') = \int dx'' K(x, t; x'', t'') K(x'', t''; x', t'). \quad (1.5)$$

Это свойство композиции пропагатора, которое будет интенсивно использоваться в дальнейшем. Конечно, это переформулировка принципа Гюйгенса с волновой точки зрения. Но что оно представляет с корпускулярной точки зрения? Если мы хотим знать амплитуду вероятности для частицы, двигающейся из начальной точки (x_i, t_i) в конечную точку (x_f, t_f) через любой промежуточный момент времени t' , то необходимо принять во внимание все возможные положения частицы, которые она может занимать, чтобы получить правильный результат. Такая ситуация часто иллюстрируется известным опытом с двумя щелями (мы не знаем определенно, через какую щель проходит частица). Эта ситуация близка к рассматриваемой, хотя и слабо отличается от нее. В эксперименте с двумя щелями известна область пространства, по которой необходимо интегрировать (щели), но не известно, где пройдет (через какую щель) частица. В рассматриваемой задаче известен момент времени, но необходимо интегрировать по всему доступному пространству.

В принципе, приведенная выше картина полностью идентична картине броуновского движения классической частицы. Единственное отличие заключается в том, что рассуждения применяются к самим вероятностям, а не к комплексным амплитудам вероятности. Но это многое меняет!

Возвращаясь к свойствам пропагатора, отметим, что для отрицательных времен он точно равен нулю и определенно не равен нулю для положительных времен. Это означает наличие сингулярности при $t - t' = 0$. Действительно, для $t = t'$ получается бесконечность:

$$\Psi(x, t) = \int dx' K(x, t; x', t) \Psi(x', t),$$

так что

$$K(x, t; x', t) = \delta(x - x'). \quad (1.6)$$

Это вся доступная информация о свойствах пропагатора, которая может быть получена из наиболее общих принципов квантовой механики. Для того, чтобы продвигаться дальше, необходима более конкретная информация. Один способ заключается в использовании уравнения Шредингера. Другой способ состоит в формулировке некоторого положения, из которого может быть получено уравнение Шредингера. Чтобы лучше прочувствовать формализм пропагаторов, рассмотрим оба способа.

Если волновая функция удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] \Psi(x, t) = 0, \quad (1.7)$$

то из (1.1) следует, что для $t > t'$ пропагатор удовлетворяет тому же самому уравнению

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] K(x, t; x', t') = 0. \quad (1.8)$$

Кроме того, учитывая (1.2) и (1.6), можно записать

$$K(x, t; x', t') \equiv \Theta(t - t') K(x, t; x', t'), \quad (1.9)$$

где $\Theta(t - t')$ - ступенчатая функция Хевисайда. Все эти свойства можно принять во внимание следующим уравнением:

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] K(x, t; x', t') = i\hbar \delta(x - x') \delta(t - t'). \quad (1.10)$$

Действительно, для $t > t'$ (1.10) сводится к (1.8), в то время как для $t \rightarrow t' + 0$ можно оставить в левой части (1.10) только член с $\partial\Theta(t - t')/\partial t$, который равен правой части.

Из (1.10) видно, что вплоть до множителя i/\hbar пропагатор есть функция Грина уравнения Шредингера в математическом смысле (если \hat{L} - линейный дифференциальный оператор, то функция Грина уравнения $\hat{L}\psi = 0$ есть решение уравнения $\hat{L}G_\psi = -\delta(x - x')$). Поэтому квантово-механические пропагаторы чаще называются функциями Грина, особенно в многочастичном случае; поскольку решение обнуляется для $t < t'$, то эта гриновская функция называется *запаздывающей функцией Грина*. Для функции $K(x, t; x', t')$ сохраним, тем не менее, название пропагатор, желая подчеркнуть, что рассматривается одночастичная задача.

Легко видеть, что для свободной частицы массы m (описываемой гамильтонианом $H = (-\hbar^2/2m) \partial^2/\partial x^2$) пропагатор зависит только от разностей его аргументов, и решение уравнения (1.10) выглядит следующим образом:

$$K_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t - t')} \right)^{d/2} \exp \left(\frac{im(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2}{2\hbar(t - t')} \right) \Theta(t - t'). \quad (1.11)$$

Здесь d - размерность пространства.

В простейшем случае одного измерения (обобщение к $d > 1$ следует непосредственно) формула (1.11) получается после фурье-преобразования (1.10):

$$\begin{aligned} K_0(x, t) &= \int K_0(k, \omega) \exp(-i(\omega t - kx)) \frac{d\omega}{2\pi} \frac{dk}{2\pi}, \\ \delta(x) &= \int \exp(ikx) \frac{dk}{2\pi}, \quad \delta(t) = \int \exp(-i\omega t) \frac{d\omega}{2\pi}, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} &\Rightarrow \hbar\omega, \quad -H_0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} (-k^2), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) K_0(k, \omega) &= i\hbar, \\ K_0(k, \omega) &= \frac{i}{\omega - \frac{\hbar k^2}{2m}}. \end{aligned}$$

Отсюда можно найти $K_0(x, t)$. Интегрирование по ω удобно провести с использованием комплексного анализа:

$$\oint d\omega \exp(-i\omega t) K_0(k, \omega) = \pm 2\pi i \sum_{\omega_0} \text{Res} [K_0(k, \omega) \exp(-i\omega t)],$$

где сумма берется по вычетам во всех полюсах $K_0(k, \omega)$ как функции комплексной переменной ω , а замкнутый контур состоит из вещественной оси и бесконечно удаленной полуокружности (в предположении, что интеграл сходится). Знак зависит от того, проходится контур в положительном или отрицательном направлении.

Так как подынтегральное выражение содержит множитель

$$\exp(-i\omega t) = \exp(-i \text{Re } \omega \cdot t + \text{Im } \omega \cdot t),$$

необходимо замыкать контур в верхней полуплоскости ω , если $t < 0$; и в нижней, если $t > 0$ (рис. 1.1). Тогда множитель $\exp(\text{Im } \omega \cdot t)$ обеспечит экспоненциальный спад подынтегрального выражения на полуокружности и сходимость интеграла (лемма Жордана).

Единственный полюс $K_0(k, \omega)$ при $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ лежит на вещественном контуре интегрирования, и добавление бесконечно малой (инфинитезимальной) мнимой части к ω смещает полюс либо в положительную, либо в отрицательную мнимую полуплоскость, что будет драматически менять ответ.

Если, например, запишем $\omega \Rightarrow \omega + i0$, то полюс будет сдвинут ниже реальной оси. Тогда для $t < 0$ контур не содержит никакой сингулярности, и $K_0(x, t)$ будет идентично равно нулю. Это то, что нужно - запаздывающий пропагатор! С другой стороны, для $t > 0$ контур содержит полюс, дающий $\exp\left(-i\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)$. Тогда интеграл для $K_0(x, t)$ будет иметь гауссову форму

$$K_0(x, t) = \Theta(t) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp\left(ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t\right),$$

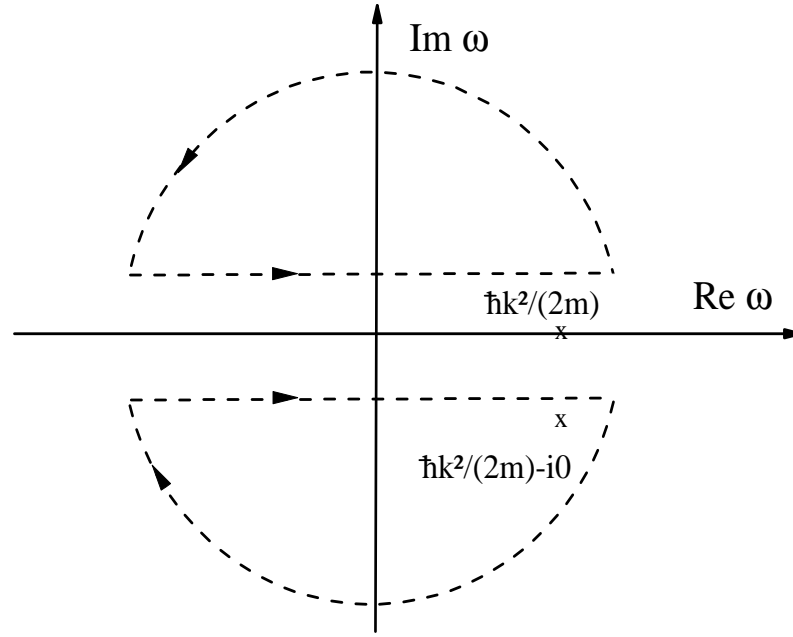


Рис. 1.1: Контур интегрирования в плоскости комплексной частоты

и

$$K_0(x - x', t - t') = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar(t - t')} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{im(x - x')^2}{2\hbar(t - t')} \right) \Theta(t - t'),$$

т.е. выражение (1.11) .

Отметим, что при смещении полюса в верхнюю полуплоскость ($\omega \Rightarrow \omega - i0$) получается *опережающая* функция Грина (*опережающий пропагатор*), обращающаяся в нуль при всех положительных временах $(t - t') > 0$. Эта игра смещений отражает тот факт, что кроме дифференциального уравнения (1.10) необходимо задать начальные условия - т.е. что решение есть запаздывающий пропагатор.

Приведенный выше результат был слишком лёгок для получения и, действительно, не стоило вводить пропагатор из "наиболее общих принципов", чтобы прибегнуть в конце концов к уравнению Шредингера. В одночастичном случае пропагатор может просто казаться математическим инструментом для решения волнового уравнения без вовлечения важной физики (как в случае многочастичной задачи). Но, как часто случается в физике, математическая переформулировка здесь также обеспечивает инструмент для более глубокого понимания основ.

1.2 Интегралы по траектории (функциональные интегралы)

Прежде всего отметим поразительное сходство между формулой (1.11) для пропагатора и хорошо известной формулой для распределения вероятностей броуновской частицы. Последняя величина $P(x, t | x', t')$ дает условную вероятность нахождения частицы в точке x в момент времени t , если в некоторое более раннее время t' она

была в точке x' :

$$P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t') = (4\pi D(t - t'))^{-d/2} \exp\left(-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2}{4D(t - t')}\right) \Theta(t - t'). \quad (1.12)$$

Коэффициент диффузии D в квантовом случае заменяется множителем $\frac{i\hbar}{2m}$. С математической точки зрения сходство между (1.11) и (1.12) обусловлено тем, что как $K_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t')$, так и $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t')$ есть функции Грина (пропагаторы) подобных дифференциальных уравнений: уравнения Шредингера для свободной частицы и уравнения диффузии

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2}.$$

Различия в поведении квантовой и классической частиц связаны с наличием мнимой единицы в одном из этих уравнений (в уравнении Шредингера). Однако с физической точки зрения это может указывать на некоторую глубокую связь между описанием классического и квантового движений.

Для достижения этой цели вспомним принцип наименьшего действия классической механики. Он утверждает, что траектория (или путь) частицы $x_{cl}(t)$ между начальной x_i, t_i и конечной x_f, t_f точками должна минимизировать действие S

$$S[x_f t_f, x_i t_i] = \int_{t_i}^{t_f} dt L(x, \dot{x}, t),$$

и это единственно допустимый реальный путь ($x_{cl}(t)$) классической частицы. Действие есть так называемый функционал траектории (не функция!), так как он зависит от поведения $x(t)$ на всем интервале $[t_i, t_f]$.

Здесь $L(x, \dot{x}, t)$ - функция Лагранжа системы: в простейшем случае

$$L(x, \dot{x}, t) = T[\dot{x}(t)] - V[x(t)],$$

где $T[\dot{x}(t)]$ и $V[x(t)]$ - кинетическая и потенциальная энергия соответственно. Условие экстремума означает, что действие нечувствительно к малым отклонениям от классического (экстремального) пути. Более конкретно: если вместо реального пути $x_{cl}(t)$ взять пробный путь $x_{tr}(t) = x_{cl}(t) + \delta x(t)$, где $\delta x(t)$ мало, то изменение в интеграле действия будет только второго порядка по $\delta x(t)$: $\delta S = 0(\delta x(t)^2)$. Это условие применяется при получении уравнений Лагранжа аналитической механики.

Для свободной частицы действие получается непосредственно:

$$S_0[x_f t_f, x_i t_i] = \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{m \dot{x}^2}{2} = \frac{m}{2} \frac{(x_f - x_i)^2}{(t_f - t_i)^2} (t_f - t_i) = \frac{m}{2} \frac{(x_f - x_i)^2}{(t_f - t_i)}.$$

Это, с точностью до множителя i/\hbar , именно то выражение, которое фигурирует в экспоненте квантовомеханического пропагатора свободной частицы!

Множитель i/\hbar очень важен. Роль \hbar ясна: так как в показателе экспоненты должна фигурировать безразмерная величина, а \hbar есть квант действия, то в квантовом случае должно появляться отношение S/\hbar . Мнимая единица обеспечивает интерференцию, которая отличает распространение квантовой частицы от движения классической частицы. Но в любом случае видно, что квантовомеханическое распространение как-то связано с классическим действием S , более конкретно с $\exp(\frac{i}{\hbar}S)$. Именно

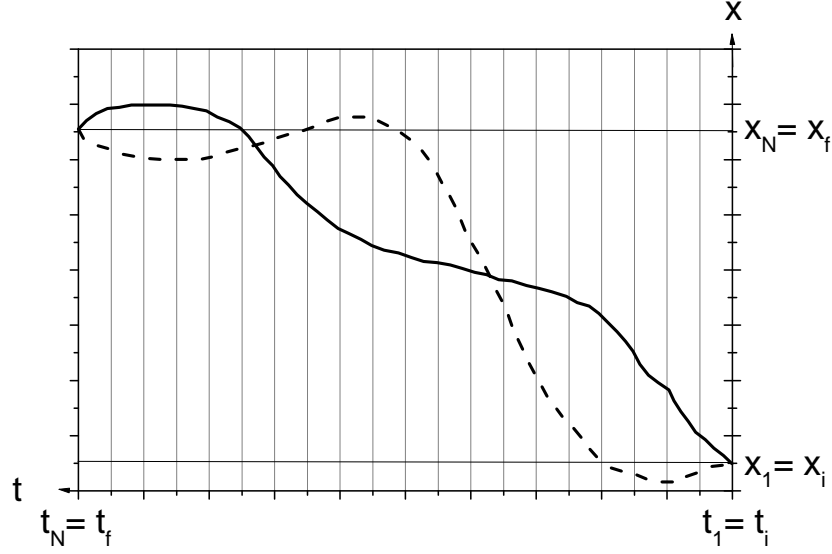


Рис. 1.2: Разбиение классических траекторий на слои

эта идея была впервые выдвинута Дираком (а затем развита Фейнманом) - амплитуда распространения квантовой частицы между двумя точками определяется когерентной суммой членов $\exp \left[\frac{i}{\hbar} S(q, \dot{q}) \right]$, соответствующих всем возможным классическим траекториям $q(t)$ между этими точками. Вместо "амплитуда распространения" можно написать "пропагатор" $K(x_f t_f, x_i t_i)$, и как было установлено - это одно и то же.

Что это дает в классическом пределе, когда по определению действие $S \gg \hbar$? Тогда $\exp(\frac{i}{\hbar} S)$ будет очень быстро осциллировать в отклике на любые мельчайшие изменения в $q(t)$. Это означает, что вклады в амплитуду перехода от всех виртуальных траекторий сокращаются! Единственным исключением будет классическая траектория: по определению малое отклонение от нее не меняет действие, так что вклад этой траектории будет "выживать". Теперь ясно, почему классические частицы выбирают классические траектории! Подобное соображение достаточно давно помогло примирить волновую теорию света с тем фактом, что свет распространяется по прямым линиям.

Для развития фундаментальной идеи, которая только что была описана, необходим некоторый способ подсчета траекторий и суммирования их вкладов. Разделим временной интервал $[t_i, t_f]$ на большое число $(N - 1)$ "тонких слоев", каждый длиной $\Delta t = \frac{t_f - t_i}{N - 1}$. Таким образом появятся N моментов времени: $t_1 \equiv t_i, t_2, \dots, t_N \equiv t_f$. Каждая классическая траектория таким образом "рассечена" на $(N - 1)$ части (см. рис.1.2): $[x_1 \equiv x_i, x_2], [x_2, x_3], \dots [x_{N-1}, x_N \equiv x_f]$.

Далее можно использовать свойство композиции пропагатора

$$K(xt, x't') = \int dx'' K(xt, x''t'') K(x''t'', x't')$$

и получить выражение

$$K(x_N t_N, x_1 t_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-2} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 K(x_N t_N, x_{N-1} t_{N-1}) \times \quad (1.13)$$

$$K(x_{N-1} t_{N-1}, x_{N-2} t_{N-2}) \dots K(x_2 t_2, x_1 t_1).$$

Конечно, точная форма $K(xt, x't')$ неизвестна. Но если $\Delta t \rightarrow 0$, то амплитуда перехода $K(x_n t_n, x_{n-1} t_{n-1})$ должна быть пропорциональна

$$\exp \left[\frac{i\Delta t}{\hbar} \left(\frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\Delta t^2} - \frac{V(x_n) + V(x_{n-1})}{2} \right) \right]. \quad (1.14)$$

Как это получено? Был использован для простоты лагранжиан

$$L(x, \dot{x}, t) = T[\dot{x}(t)] - V[x(t)],$$

который, тем не менее, является достаточно общим. На коротких временных интервалах Δt доминирует кинетический член, в потенциале можно заменить $x(t)$ на $x_{cl}(t)$, следовательно, можно учитывать только классическую траекторию между соседними точками. И, наконец, классическое действие на этой траектории было аппроксимировано средней величиной функции Лагранжа.

Выражение (1.14) не содержит нормировочный множитель (размерность пропагатора обратно пропорциональна объему, L^{-d}). Он может быть определен из условия

$$K(x, t; x', t) = \delta(x - x'),$$

и одного из предельных представлений δ -функции Дирака

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\alpha\pi i}} \exp\left(\frac{ix^2}{\alpha}\right),$$

а именно, он должен быть равен $\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{d/2}$. Это именно тот множитель, который получается для свободного пропагатора из уравнения Шредингера, но здесь уравнение Шредингера никак не использовалось.

Подставляя этот вид пропагатора (для инфинитезимального Δt)

$$K(x\Delta t, x'0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{d/2} \exp \left[\frac{i\Delta t}{\hbar} \left(\frac{m(x - x')^2}{2\Delta t^2} - \frac{V(x) + V(x')}{2} \right) \right]$$

в уравнение композиции, получим

$$\begin{aligned} K(x_N t_N, x_1 t_1) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-2} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \left(\prod_{n=2}^N \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t} \right)^{d/2} \right) \times \\ &\exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N \Delta t \left(\frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\Delta t^2} - \frac{V(x_n) + V(x_{n-1})}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Видно, что экспонента этой нетривиальной конструкции содержит i/\hbar , умноженное на риманову сумму для интеграла, представляющего классическое действие вдоль некоторого пути $x(t)$. Предел бесконечного числа последовательных интегрирований по промежуточным координатам x_n с соответствующими нормировочными множителями называется континуальным (функциональным) интегралом или просто интегралом по траектории и обозначается $\int Dx$. Тогда

$$K(xt, x't') = \int_{x'(t')}^{x(t)} Dx \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x(t), \dot{x}(t), t) \right]. \quad (1.16)$$

Это выражение можно переписать в более симметричном и более общем виде

$$K(xt, x't') = \int_{x'(t')}^{x(t)} Dx \int D \frac{p}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(p(t), x(t), t) \right], \quad (1.17)$$

где

$$S(p(t), x(t), t) = \int_{t'}^t dt \left[p\dot{x} - H(p(t), x(t), t) \right]$$

действие, выраженное через канонические переменные;

$$H(p, x, t) = \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - L(x, \dot{x}, t) -$$

функция Гамильтона частицы. Так как приведенное выше выражение для S явно содержит H , оно оказывается более полезным в приложениях метода интегралов по траектории к системам со многими степенями свободы. Но для рассматриваемых ограниченных целей будет достаточно продемонстрировать эквивалентность (1.16) и (1.17), одновременно объясняя значение символа Dp .

Простейший путь проделать это заключается в использовании уравнения Шредингера для пропагатора. Но теперь мы не постулируем уравнение Шредингера, а получим из (1.16), сохраняя непротиворечивость рассуждений.

Выражение для пропагатора (1.15) при инфинитезимальных временах - интегральное уравнение композиции - может быть приведено к дифференциальному уравнению.

Используя выражение (1.15), можно записать для одномерного случая (обобщения тривиальны)

$$\begin{aligned} K(x_N(t_{N-1} + \Delta t), x_1 t_1) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{1/2} \times \\ &\exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m(x_N - x_{N-1})^2}{2\Delta t^2} - \frac{V(x_N) + V(x_{N-1})}{2} \right) \Delta t \right] \times \\ &K(x_{N-1} t_{N-1}, x_1 t_1) \end{aligned}$$

с одной стороны, и

$$K(x_N(t_{N-1} + \Delta t), x_1 t_1) \approx K(x_N t_{N-1}, x_1 t_1) + \Delta t \frac{\partial}{\partial t_{N-1}} K(x_N t_{N-1}, x_1 t_1)$$

- с другой. Затем разложим функции под интегралом

$$\begin{aligned} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m(x_N - x_{N-1})^2}{2\Delta t^2} - \frac{V(x_N) + V(x_{N-1})}{2} \right) \Delta t \right] &\approx \exp \left[\frac{i}{\hbar} \frac{m(x_N - x_{N-1})^2}{2\Delta t} \right] \times \\ &\left[1 - \frac{i}{\hbar} V(x_N) \Delta t \right], \end{aligned}$$

$$K(x_{N-1}t_{N-1}, x_1t_1) \approx K(x_Nt_{N-1}, x_1t_1) - (x_N - x_{N-1}) \frac{\partial}{\partial x_N} K(x_Nt_{N-1}, x_1t_1) + \frac{(x_N - x_{N-1})^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_N^2} K(x_Nt_{N-1}, x_1t_1).$$

Интегрируя по x_{N-1} , что легко проделать, поскольку интегралы гауссова типа, и сохраняя главные члены по Δt , получаем

$$\Delta t \frac{\partial}{\partial t_{N-1}} K(x_Nt_{N-1}, x_1t_1) = -\frac{i}{\hbar} V(x_N) \Delta t K(x_Nt_{N-1}, x_1t_1) + \frac{i\hbar}{2m} \Delta t \frac{\partial^2}{\partial x_N^2} K(x_Nt_{N-1}, x_1t_1) + 0(\Delta t).$$

Деля на Δt и переходя к пределу $\Delta t \rightarrow 0$, получаем уравнение

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] K(x, t; x', t') = 0,$$

т.е. уравнение Шредингера для пропагатора для $t > t'$. Таким образом, было продемонстрировано, что уравнение Шредингера следует из предположения Дирака-Фейнмана о структуре амплитуды перехода (обратное тоже справедливо).

Вернемся к основному уравнению

$$\Psi(x, t) = \int dx' K(x, t; x', t') \Psi(x', t'),$$

которое определяет действие пропагатора на волновую функцию. Используя дираковские обозначения “бра” и “кэт”, в которых волновая функция $\Psi(x, t)$ представляется как скалярное произведение двух абстрактных векторов в гильбертовом пространстве

$$\Psi(x, t) = \langle x | \Psi(t) \rangle,$$

можно записать

$$\langle x | \Psi(t) \rangle = \sum_{x'} \langle x | S(t, t') | x' \rangle \langle x' | \Psi(t') \rangle \equiv \langle x | S(t, t') | \Psi(t') \rangle. \quad (1.18)$$

Здесь было использовано условие замкнутости квантовых состояний частицы с определенной координатой $|x\rangle$, т.е.

$$\sum_{x'} |x'\rangle \langle x'| = I,$$

где I - единичный оператор.

Видно, что пропагатор $K(x, t; x', t')$ для $t > t'$ есть матричный элемент некоторого зависящего от времени оператора $S(t, t')$

$$K(x, t; x', t') = \langle x | S(t, t') | x' \rangle.$$

Уравнение для пропагатора может быть записано в общем (операторном) виде относительно к базису (представлению)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S(t, t') = H S(t, t'),$$

и его формальное решение имеет вид

$$S(t, t') = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(t - t') \right].$$

Так как $\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$ (условие ортогональности для собственных состояний координаты), то приведенное выше решение действительно удовлетворяет начальному условию для пропагатора $K(x, t; x', t - 0) = \delta(x - x')$. В чем выгода? В том, что сейчас мы не ограничены координатным представлением, и можно легко работать в, скажем, импульсном пространстве. Это то, что действительно нужно для доказательства (1.17). Кроме того, будет необходимо условие полноты для собственных состояний импульса $|p\rangle$

$$\sum_{p'} |p'\rangle \langle p'| = I.$$

Вспомним, что в координатном (импульсном) представлении собственные состояния выглядят следующим образом:

$$\Psi_x(x') \equiv \langle x' | x \rangle = \delta(x - x'); \quad \Psi_p(x') \equiv \langle x' | p \rangle = \exp \left(\frac{i}{\hbar} p x' \right)$$

и, соответственно,

$$\tilde{\Psi}_x(p') \equiv \langle p' | x \rangle = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} x p' \right); \quad \tilde{\Psi}_p(p') \equiv \langle p' | p \rangle = \delta(p - p').$$

Сейчас, наконец, можно вернуться к вычислению пропагатора через интегралы по траектории. В полном согласии с предыдущим подходом разбиваем временной интервал $[t_f = t_N, t_i = t_1]$ на тонкие слои $\Delta t = \frac{t_f - t_i}{N-1}$ и используем свойство композиции:

$$\langle x_N | S(t_N, t_1) | x_1 \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x_N | S(t_N, t_{N-1}) S(t_{N-1}, t_{N-2}) \dots S(t_2, t_1) | x_1 \rangle. \quad (1.19)$$

Здесь гамильтониан есть функция операторов координат и импульса - $H = H(p, x)$.

Можно вставить между каждыми двумя пропагаторами единичный оператор $\sum_x |x\rangle \langle x| \sum_p |p\rangle \langle p|$. Очевидно

$$\begin{aligned} \langle x_m | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(p, x) \Delta t \right] | p_m \rangle \langle p_m | x_{m-1} \rangle &= \langle x_m | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(p_m, x_m) \Delta t \right] | p_m \rangle \langle p_m | x_{m-1} \rangle \\ &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} p_m x_m \right] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(p_m, x_m) \Delta t \right] \times \\ &\quad \exp \left[-\frac{i}{\hbar} p_m x_{m-1} \right]. \end{aligned}$$

Отметим, что вместо оператора Гамильтона получили функцию Гамильтона, зависящую от обычных координат и импульса. Поэтому уравнение (1.19) сводится к

$$\begin{aligned} \langle x_N | S(t_N, t_1) | x_1 \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=2}^{N-1} dx_n \int \prod_{n=2}^N \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \times \\ &\quad \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N \Delta t \left[p_n \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} - H(p_n, x_n) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Здесь были восстановлены обозначения для непрерывного изменения величин (т.е. $\sum_x \Rightarrow \int dx$, $\sum_p \Rightarrow \int \frac{dp}{2\pi\hbar}$). Это и есть интеграл по траектории в фазовом пространстве (т.е. интеграл по координатам и импульсам), краткая запись которого дана формулой (1.17). Заметим, что здесь в определении Dx не включены нормировочные множители $(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t})^{1/2}$. В действительности, они получаются при интегрировании по импульсам, и нет общего соглашения по поводу того, должны ли они быть записаны явно или нет. Выражение (1.20) содержит $N - 1$ импульс и N координат, но есть $N - 2$ интегрирования по координатам и $N - 1$ - по импульсам. В результате имеются две "свободные" координаты, начальная и конечная, как должно быть для пропагатора в координатном представлении. Но ничто не удерживает от вычисления другого матричного элемента S , скажем, $\langle p_f | S(t_f, t_i) | p_i \rangle$. Очевидно, это должен быть пропагатор в импульсном представлении, дающий амплитуду вероятности для частицы изменить импульс от p_i к p_f .

Можно показать, что соответствующий интеграл по траектории может быть записан как

$$K(pt, p't') = \int_{p'(t')}^{p(t)} D\frac{p}{2\pi\hbar} \int Dx \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(p(t), x(t), t) \right]. \quad (1.21)$$

Таким образом, интегралы по траектории обычно не коммутируют!

Последнее, что необходимо сейчас продемонстрировать - это то, что (1.20) дает начальное выражение (1.16), т.е. интеграл по траектории в конфигурационном пространстве. Возьмем функцию Гамильтона в виде $H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$. В (1.20) можно легко выполнить интегрирование по импульсам, т.к. соответствующие интегралы являются гауссовыми

$$\int \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N \Delta t \left[p_n \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} - \frac{p_n^2}{2m} \right] \right\} = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2i\hbar\Delta t} \right],$$

что приводит к (1.16).

1.3 Теория возмущений для пропагатора

Хотя всегда можно записать формулу для интеграла по траектории (1.16), явное выражение для пропагатора в общем виде не может быть найдено, ни непосредственно, ни решением уравнения Шредингера

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] K(x, t; x', t') = i\hbar \delta(x - x') \delta(t - t').$$

За исключением точно решаемых задач (которые как красивы, так и редки) - единственный регулярный способ решения задачи заключается в использовании некоторого вида теории возмущений. К счастью, пропагаторный формализм уникально подходит для такого решения.

Будем вновь работать в обозначениях Дирака. Начнем с представления Шредингера, в котором операторы наблюдаемых величин не зависят от времени за исключением явной временной зависимости, не меняющей формы оператора, а векторы состояний (волновые функции) эволюционируют во времени согласно уравнению

Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle_S = H |\Phi(t)\rangle_S.$$

Если гамильтониан не зависит от времени, то формальное решение этого уравнения имеет вид

$$|\Phi(t)\rangle_S = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right) |\Phi(0)\rangle_S. \quad (1.22)$$

С гамильтонианом работали как с числом; конечно, операторная экспонента имеет смысл только как разложение в ряд

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right) = I - \frac{i}{\hbar} Ht + \frac{1}{2} \left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right)^2 + \dots,$$

где I — единичный оператор, и справедливость (1.22) вытекает из того, что можно переписать уравнение Шредингера как

$$|\Phi(t)\rangle_S = |\Phi(0)\rangle_S - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt H |\Phi(t)\rangle_S,$$

а затем, выполняя итерации, получим ряд для $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right)$.

Оператор

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right)$$

по очевидным причинам называется "оператор эволюции". Записанный в такой форме, он удовлетворяет уравнению Шредингера с независимым от времени гамильтонианом. Что будет в случае, когда H зависит от времени? Для с-числа решение было бы

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' H(t')\right].$$

Но $H(t)$ — оператор, поэтому $H(t_1)$ и $H(t_2)$ в общем случае не коммутируют между собой, и приведенное выше выражение будет неверным. Однако можно выполнить итерации с уравнением Шредингера:

$$U(t) = I + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_0^t dt' H(t') U(t'),$$

что дает

$$U(t) = I + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_0^t dt'_1 H(t'_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt'_1 \int_0^{t'_1} dt'_2 H(t'_1) H(t'_2) + \quad (1.23)$$

$$\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_0^t dt'_1 \int_0^{t'_1} dt'_2 \int_0^{t'_2} dt'_3 H(t'_1) H(t'_2) H(t'_3) + \dots, \quad (1.24)$$

где $t > t'_1 > t'_2 > t'_3 \dots$. В этом выражении операторы упорядочены во времени (хронологически упорядочены), так что оператор с бóльшим временным аргументом всегда

стоит левее. Можно ввести оператор хронологического упорядочения T , действие которого на любой набор зависящих от времени операторов выглядит следующим образом

$$T[A(t_A)B(t_B)C(t_C)\dots] = \begin{cases} A(t_A)B(t_B)C(t_C)\dots, & t_A > t_B > t_C\dots \\ B(t_B)A(t_A)C(t_C)\dots, & t_B > t_A > t_C\dots \\ C(t_C)A(t_A)B(t_B)\dots, & t_C > t_A > t_B\dots \\ \dots\dots\dots \end{cases}$$

Этот оператор позволяет представить ряд (1.23) в компактном виде

$$U(t) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau H(\tau) \right]. \quad (1.25)$$

Действительно, разложим экспоненту и рассмотрим n -тый член

$$\frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_0^t d\tau_1 \int_0^t d\tau_2 \dots \int_0^t d\tau_n H(\tau_1) H(\tau_2) \dots H(\tau_n),$$

где n -мерный интеграл берется по области ($0 \leq \tau_1 \leq t$, $0 \leq \tau_2 \leq t$, $\dots 0 \leq \tau_n \leq t$). Можно взять часть этой области, где $\tau_1 \geq \tau_2 \geq \tau_3 \dots \geq \tau_n$. Соответствующий интеграл совпадает с n -тым членом в разложении (1.23), если забыть о множителе $n!$. Но переменные интегрирования безразличны и могут быть переранжированы точно $n!$ способами, что дает тот же результат (оператор временного упорядочения всегда будет обеспечивать расположение операторов в надлежащем порядке). Поэтому можно просто умножить результат на $n!$, что доказывает справедливость (1.25).

Выпишем основные свойства оператора эволюции, вытекающие из его определения:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) &= H(t)U(t), \\ U^\dagger(t) &= U^{-1}(t), \\ U(0) &= I. \end{aligned}$$

Вторая строчка содержит важнейшее свойство унитарности, которое означает, что вероятность не может быть потеряна при эволюции квантового состояния (сохранение нормировки) - если вначале была одна частица, то в конце не может быть $1/3$ или $11/9$. Действительно, норма вектора состояния, связанная с вероятностью,

$$\|\Phi(t)\| = \sqrt{\langle \Phi(t) | \Phi(t) \rangle} = \sqrt{\langle \Phi(0) | U^\dagger(t) U(t) | \Phi(0) \rangle} = \sqrt{\langle \Phi(0) | \Phi(0) \rangle} = const,$$

сохраняется.

Конечно, момент времени $t = 0$ ничем не выделен, можно рассматривать эволюцию квантового состояния начиная с любого момента времени: очевидно, для любых t и t'

$$|\Phi(t)\rangle_S = U(t)U^\dagger(t') |\Phi(t')\rangle_S = S(t, t') |\Phi(t')\rangle_S,$$

где S -оператор определен как

$$S(t, t') = U(t)U^\dagger(t').$$

Сейчас выразим, например, волновую функцию частицы в координатном пространстве в момент времени t через ее величину в некоторый предыдущий момент t' :

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= \langle x | \Phi(t) \rangle_S = \langle x | S(t, t') | \Phi(t') \rangle_S = \\ &= \int dx' \langle x | S(t, t') | x' \rangle \langle x' | \Phi(t') \rangle_S = \\ &= \int dx' \langle x | S(t, t') | x' \rangle \Psi(x', t').\end{aligned}$$

Видно, что это именно тот оператор, связанный с пропагатором, который был ранее введен (см. 1.18): для $t > t'$

$$K(x, t; x', t') = \langle x | S(t, t') | x' \rangle.$$

Этот оператор (иногда называемый S -матрицей) имеет следующие свойства:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} S(t, t') &= H(t) S(t, t'), \\ S(t, t) &= I, \\ S^\dagger(t, t') &= S^{-1}(t, t') = S(t', t), \\ S(t, t'') S(t'', t') &= S(t, t'), \\ S(t, t') &= \text{T exp} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t d\tau H(\tau) \right] = \\ &= \left(\exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(t - t') \right], \text{ если } H \neq H(t) \right) \text{ для } t > t' .\end{aligned}$$

Третья строка выражает условие унитарности. Четвертая - следует из определения S и унитарности оператора эволюции; но это именно то свойство композиции, которое было введено для пропагатора (1.5):

$$K(x, t; x', t') = \int dx'' K(x, t; x'', t'') K(x'', t''; x', t').$$

Последняя строка следует из (1.25). Это красивая, компактная формула, но не очень практичная: гамильтониан системы "порядка единицы" и разложение будет сходиться очень медленно или просто расходиться! К счастью, в большинстве случаев гамильтониан может быть разделен на две части: невозмущенный, не зависящий от времени, гамильтониан (для которого предположительно известно решение) и малое, зависящее от времени, возмущение:

$$H(t) = H_0 + W(t).$$

Цель заключается в том, чтобы представить решение для H как решение для H_0 плюс поправки по степеням малого возмущения. Последний ряд будет надежно сходиться.

До сих пор использовалось представление Шредингера, в котором векторы состояния были зависящими от времени (что определяется действием $U(t)$), а операторы были постоянны (если нет явной зависимости от времени). Противоположная картина в представлении Гейзенберга. Это представление может быть получено каноническим преобразованием с использованием оператора эволюции:

$$\begin{aligned}|\Phi\rangle_H &= U^\dagger(t) |\Phi(t)\rangle_S \equiv |\Phi(0)\rangle_S; \\ A_H(t) &= U^\dagger(t) A_S U(t).\end{aligned}$$

Теперь оператор эволюционирует во времени, в то время как векторы состояний постоянны. Операторы удовлетворяют гейзенберговским уравнениям движения:

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_H(t).$$

Эти уравнения непосредственно следуют из определения A_H и свойств оператора эволюции. Здесь частная производная означает производную по явной зависимости от времени оператора (например, вследствие изменения внешних условий). Гамильтониан, если он явно зависит от времени, так же должен быть в представлении Гейзенберга: $H_H(t) = U^\dagger(t) H(t) U(t)$.

Более удобно использовать промежуточное представление - представление взаимодействия, введенное впервые Дираком. В этом представлении как операторы, так и векторы состояний зависят от времени, но эволюция операторов определяется невозмущенным гамильтонианом (не будем использовать индекс I для операторов и векторов состояний в представлении взаимодействия, т.к. это будет рабочее представление):

$$\begin{aligned} A(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) A_S \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right); \\ i\hbar \frac{d}{dt} A(t) &= [A(t), H_0] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A(t). \end{aligned} \quad (1.26)$$

Последняя строка есть точно уравнение Гейзенберга для оператора в невозмущенной системе (отметим, что H_0 не зависит от времени, он один и тот же в представлении Шредингера и представлении взаимодействия).

Векторы состояний в представлении взаимодействия определяются следующим каноническим преобразованием

$$|\Phi(t)\rangle = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) |\Phi(t)\rangle_S$$

и удовлетворяют уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = W(t) |\Phi(t)\rangle. \quad (1.27)$$

Здесь $W(t)$ должно быть в представлении взаимодействия,

$$W(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) W_S(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right),$$

как можно получить из первоначального уравнения Шредингера (использовано то, что оператор $U(t)U^\dagger(t) = I$ можно вставить в любом месте, где это необходимо). Выгода этого представления заключается в том, что векторы состояния подвергаются воздействию только возмущения. Сейчас можно почти буквально повторить все вычисления, выполненные в начале этого раздела. Например, итерируя (1.27), можно найти решение

$$|\Phi(t)\rangle = T \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau W(\tau)\right] |\Phi(0)\rangle,$$

с тем же самым оператором хронологизации.

Сейчас можно найти явное выражение для S -оператора в представлении взаимодействия. Самый простой способ заключается во введении вспомогательного оператора $\theta(t, t') \equiv \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) S_S(t, t')$, который, как легко показать, удовлетворяет тому же уравнению, что и векторы состояний:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \theta(t, t') = W(t) \theta(t, t').$$

Тогда, конечно,

$$\theta(t, t') = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t d\tau W(\tau) \right] \theta(t', t'),$$

так что сам S -оператор может быть записан в виде (для $t > t'$):

$$S_S(t, t') = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t \right) T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t d\tau W(\tau) \right] \exp \left(\frac{i}{\hbar} H_0 t' \right).$$

Это так называемое разложение Дайсона в представлении Шредингера. Тогда, согласно (1.26),

$$S(t, t') = \exp \left(\frac{i}{\hbar} H_0 t \right) S_S(t, t') \exp \left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t' \right) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t d\tau W(\tau) \right]. \quad (1.28)$$

$S(t, t')$ в этом выражении выглядит как зависящий только от возмущения! Конечно, невозмущенный гамильтониан спрятан в $W(\tau)$; но предположительно известно, как что-либо ведет себя без возмущения.

Пропагатор был представлен как матричный элемент S -оператора. Есть другое выражение, иногда полезное в многочастичном случае. Чтобы прийти к нему, вернемся к представлению Гейзенберга с зависящими от времени операторами. В представлении Шредингера оператор координаты имеет зависящие от времени собственные состояния, которые образуют полный набор в гильбертовом пространстве,

$$\begin{aligned} x_S |x\rangle &= x |x\rangle, \\ \sum_x |x\rangle \langle x| &= I \end{aligned}$$

(в координатном представлении они просто дельта-функции, а в импульсном представлении - плоские волны). Введем набор мгновенных собственных состояний оператора координаты в представлении Гейзенберга $\{|xt\rangle\}$:

$$x_H(t) |xt\rangle = x |xt\rangle.$$

Так как

$$x_H(t) |xt\rangle = U^\dagger(t) x_S U(t) |xt\rangle = U^\dagger(t) x_S |x\rangle,$$

видно, что временная эволюция этих состояний определяется $U^\dagger(t)$ (вместо $U(t)$), и они образуют полный набор в любой момент времени t :

$$\begin{aligned} |xt\rangle &= U^\dagger(t) |x\rangle, \\ \sum_x |xt\rangle \langle xt| &= \sum_x U^\dagger(t) |x\rangle \langle x| U(t) = U^\dagger(t) U(t) = I. \end{aligned}$$

Сейчас можно переписать пропагатор в координатном пространстве просто как произведение двух состояний из этого базиса:

$$\begin{aligned} K(x, t; x', t') &= \langle x | S(t, t') | x' \rangle \equiv \\ &\equiv \langle x | U(t) U^\dagger(t') | x' \rangle = \langle xt | x't' \rangle. \end{aligned}$$

Из этого выражения непосредственно следует выражение для пропагатора в импульсном пространстве:

$$\begin{aligned} K(p, t; p', t') &= \int dx \int dx' \langle p | x \rangle \langle xt | x't' \rangle \langle x' | p' \rangle = \\ &= \int dx \int dx' \langle pt | xt \rangle \langle xt | x't' \rangle \langle x't' | p't' \rangle = \\ &= \langle pt | p't' \rangle. \end{aligned}$$

Состояния $\{|pt\rangle\}$ являются, конечно, мгновенными собственными состояниями оператора импульса в представлении Гейзенберга $p_H(t)$.

Полученные формулы являются очень общими: в действительности они применимы к любой квантовой системе вне зависимости от числа частиц и типа взаимодействия.

Применим их к простейшей задаче - бесструктурная квантовая частица. Тогда есть единственный вид для оператора возмущения, скалярный внешний потенциал, координатный матричный элемент которого есть

$$\langle x | W(t) | x' \rangle = V(x, t) \delta(x - x').$$

Естественно тогда работать в координатном представлении; взяв соответствующий матричный элемент от $S(t, t')$,

$$K(x, t; x', t') = \langle x | S_S(t, t') | x' \rangle,$$

получим разложение по возмущению для пропагатора:

$$\begin{aligned} K(x, t; x', t') &= K_0(x, t; x', t') + \\ &\int dx'' \int dt'' K_0(x, t; x'', t'') \left(-\frac{i}{\hbar} V(x'', t'') \right) K_0(x'', t''; x', t') + \dots \end{aligned}$$

Это выражение можно представить графически (рис. 1.3). Рисунок есть простейший пример *диаграммы Фейнмана*.

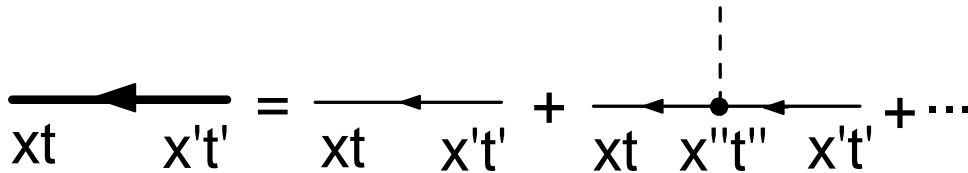


Рис. 1.3: Диаграмма Фейнмана для потенциального рассеяния

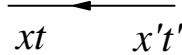
	$K(x, t; x', t')$	Пропагатор
	$K_0(x, t; x', t')$	Невозмущенный пропагатор, пропагатор свободной частицы
	$-iV/\hbar$	Внешний потенциал в представлении взаимодействия

Рис. 1.4: Фейнмановские правила для частицы во внешнем потенциальном поле. Предполагается интегрирование по всем промежуточным координатам и временам

Элементы этой диаграммы объяснены на рис. 1.4.

В случае рассматриваемой задачи диаграмма Фейнмана кажется излишней в силу простой структуры введенного возмущения. Однако в многочастичном случае структура членов, входящих в ряд по возмущению, значительно более сложная, а диаграммы являются большим подспорьем в постижении этой структуры и выполнении физически последовательных приближений. Рассматриваемая диаграмма дает ясную картину для квантовой частицы, повторно рассеиваемой внешним потенциалом, но движущейся свободно между актами рассеяния.

Полезно посмотреть, как (и так ли) эта интуитивная картина согласуется с описанием на языке интегралов по траектории поведения квантовой частицы. Будет именно тот результат, который может быть легко получен непосредственно из формулы:

$$K(x_N t_N, x_1 t_1) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-2} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \left(\prod_{n=2}^N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{d/2} \right) \times \\ \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N \Delta t \left(\frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\Delta t^2} - \frac{V(x_n) + V(x_{n-1})}{2} \right) \right].$$

Необходимо только разложить экспоненты, содержащие потенциал, и представить это выражение как ряд по степеням внешнего потенциала V .

Член нулевого порядка, очевидно, есть невозмущенный пропагатор $K_0(x_N t_N, x_1 t_1)$.

Член первого порядка

$$K_1(x_N t_N, x_1 t_1) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-2} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \left(\prod_{n=2}^N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{d/2} \right) \times \\ \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N \Delta t \frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\Delta t^2} \right] \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{k=2}^N \Delta t V(x_k, t_k) \right\}.$$

Это выражение можно переписать так:

$$K_1(x_N t_N, x_1 t_1) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{k=2}^N \Delta t \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-2} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \left(\prod_{n=2}^N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{d/2} \right) \times \right. \\ \left. \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N \Delta t \frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\Delta t^2} \right] V(x_k, t_k) \right\} \\ = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{k=2}^N \Delta t \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \left[dx_{k-1} \dots dx_2 \left(\prod_{n=2}^k \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{d/2} \right) \times \right. \right. \\ \left. \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^k \Delta t \frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\Delta t^2} \right] V(x_k, t_k) \times \right. \\ \left. \left[\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} dx_{N-2} \dots dx_{k+1} \left(\prod_{n=k+1}^N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{d/2} \right) \times \right. \right. \\ \left. \left. \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=k+1}^N \Delta t \frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\Delta t^2} \right] \right] \right] \right\}.$$

Таким образом,

$$K_1(x_N t_N, x_1 t_1) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_N} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx K_0(x_N t_N, xt) V(x, t) K_0(xt, x_1 t_1) \equiv \\ \equiv -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx K_0(x_N t_N, xt) V(x, t) K_0(xt, x_1 t_1)$$

(в последнем преобразовании принято во внимание, что для $t < t_1$ или $t > t_N$ подынтегральное выражение тождественно равно нулю). Из этого вывода ясно, что действительно, в картине интегралов по траектории можно рассматривать эффекты внешнего потенциала как результат множественных рассеяний свободной во всех других отношениях частицы.

Следующие члены разложения могут быть получены тем же способом. Множители $1/n!$ в разложении экспоненты будут сокращаться, т.к. будет точно $n!$ способов переобозначить точки x_k, t_k , в которых наблюдается рассеяние.

Конечно, рассмотрение не ограничено координатным представлением; фактически чаще удобнее использовать импульсное представление. Фейнмановские правила для построения диаграмм в импульсном пространстве представлены на рис. 1.5.


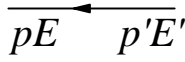

	$K(p, E; p', E')$	Пропагатор
	$K_0(p, E; p', E')$	Невозмущенный пропагатор, пропагатор свободной частицы
	$-iV(p, E) / \hbar$	Фурье-образ внешнего потенциала

Рис. 1.5: Правила Фейнмана для частицы во внешнем потенциальном поле в импульсном представлении. Предполагается интегрирование по всем промежуточным импульсам и энергиям с учетом сохранения импульса (энергии) в каждой вершине (узле)

Глава 2

Функции Грина при $T = 0$

2.1 Определение функций Грина многочастичной системы

Изложение начнем с несколько видоизмененного аппарата вторичного квантования на языке полевых операторов, вводимых соотношениями

$$\psi(\xi) = \sum_i \varphi_i(\xi) a_i \quad \text{и} \quad \psi^\dagger(\xi) = \sum_i \varphi_i^*(\xi) a_i^\dagger,$$

где a_i (a_i^\dagger) - обычные операторы вторичного квантования, $\{\varphi_i(\xi)\}$ - некоторая полная система ортогональных и нормированных волновых функций стационарных состояний одной частицы. ξ означает совокупность координат и проекции спина σ частицы, а под интегрированием по $d\xi$ будет подразумеваться интегрирование по координатам вместе с суммированием по σ :

$$\int ... d\xi \Rightarrow \sum_\sigma \int ... dx dy dz.$$

Оператор $\psi^\dagger(\xi_0)$ создает частицу, находящуюся в точке ξ_0 . Действительно, в результате действия оператора a_i^\dagger создается частица в состоянии с волновой функцией $\varphi_i(\xi)$. Отсюда следует, что в результате действия оператора $\psi^\dagger(\xi_0)$ создается частица в состоянии с волновой функцией

$$\sum_i \varphi_i^*(\xi_0) \varphi_i(\xi) = \delta(\xi - \xi_0),$$

что и соответствует частице с определенным значением координат и спина

$$\delta(\xi - \xi_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \delta_{\sigma\sigma_0}.$$

Для операторов рождения и уничтожения имеют место коммутационные соотношения:

а) бозоны:

$$[b_m, b_n^\dagger] = b_m b_n^\dagger - b_n^\dagger b_m = \delta_{mn}; [b_m, b_n] = 0; [b_m^\dagger, b_n^\dagger] = 0;$$

б) фермионы:

$$\{a_m, a_n^\dagger\} = a_m a_n^\dagger + a_n^\dagger a_m = \delta_{mn}; \{a_m, a_n\} = 0; \{a_m^\dagger, a_n^\dagger\} = 0.$$

Используя эти соотношения, можно получить коммутационные соотношения для полевых операторов:

а) бозоны:

$$\begin{aligned} [\psi(\xi), \psi^\dagger(\eta)] &= \psi(\xi)\psi^\dagger(\eta) - \psi^\dagger(\eta)\psi(\xi) = \\ &= \sum_{ij} \left\{ \varphi_i(\xi)\varphi_j^*(\eta)b_i b_j^\dagger - \varphi_j^*(\eta)\varphi_i(\xi)b_j^\dagger b_i \right\} = \\ &= \sum_{ij} \varphi_i(\xi)\varphi_j^*(\eta) [b_i, b_j^\dagger] = \sum_{ij} \varphi_i(\xi)\varphi_j^*(\eta)\delta_{ij} = \\ &= \sum_{ij} \varphi_i(\xi)\varphi_i^*(\eta) = \delta(\xi - \eta); \end{aligned}$$

б) фермионы:

$$\begin{aligned} \{\psi(\xi), \psi^\dagger(\eta)\} &= \sum_{ij} \varphi_i(\xi)\varphi_j^*(\eta) \{a_i, a_j^\dagger\} = \\ &= \sum_{ij} \varphi_i(\xi)\varphi_i^*(\eta) = \delta(\xi - \eta). \end{aligned}$$

Коммутаторы для бозонных и антикоммутаторы для фермионных полевых операторов рождения или уничтожения равны нулю.

Имеется аналогия между выражением, определяющим полевые операторы (ψ - операторы), и разложением

$$= \sum_i a_i \varphi_i$$

произвольной волновой функции по некоторой полной системе функций. Здесь оно как бы снова квантуется, откуда и происходит название всего этого метода - вторичное квантование.

Оператор полного числа частиц в системе может быть выражен через полевые операторы. Действительно,

$$N = \sum_i a_i^\dagger a_i.$$

Согласно квантовой механике, определение полевого оператора можно рассматривать как разложение по собственным функциям, образующим полный ортонормированный набор $\{\varphi_i(\xi)\}$. Тогда коэффициенты разложения:

$$a_i = \int \varphi_i^*(\xi)\psi(\xi)d\xi, \quad a_i^\dagger = \int \varphi_i(\xi)\psi^\dagger(\xi)d\xi.$$

Тогда для N имеем:

$$\begin{aligned} N &= \sum_i a_i^\dagger a_i = \int \int \sum_i \varphi_i(\xi)\psi^\dagger(\xi)\varphi_i^*(\eta)\psi(\eta)d\xi d\eta = \\ &= \int \int d\xi d\eta \sum_i \varphi_i(\xi)\varphi_i^*(\eta)\psi^\dagger(\xi)\psi(\eta)d\xi d\eta = \\ &= \int \int d\xi d\eta \delta(\xi - \eta)\psi^\dagger(\xi)\psi(\eta)d\xi d\eta = \int d\xi \psi^\dagger(\xi)\psi(\xi). \end{aligned}$$

Итак,

$$N = \int d\xi \psi^\dagger(\xi) \psi(\xi) = \int d\xi n(\xi),$$

где $n(\xi) = \psi^\dagger(\xi) \psi(\xi)$ - оператор плотности числа частиц.

Произвольный одночастичный оператор $f^{(1)}$ запишется через полевые операторы:

$$F^{(1)} = \int \psi^\dagger(\xi) f^{(1)} \psi(\xi) d\xi.$$

Здесь оператор $f^{(1)}$ действует в $\psi(\xi)$ на функции параметров ξ .

Аналогично записываются двухчастичные и более сложные операторы, например:

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \int \int \psi^\dagger(\xi) \psi^\dagger(\xi') f^{(2)} \psi(\xi') \psi(\xi) d\xi d\xi'.$$

Когда рассматриваются одночастичные состояния в представлении вторичного квантования, то с математической точки зрения работал бы любой полный набор функций, зависящих от координат одной частицы. Но с точки зрения физики это не так: этот набор должен быть выбран "физически разумным образом". То есть, так как практически никогда невозможно точно решить уравнения и невозможно всегда обеспечить "эпсилон-дельта" стиль оценки введенных приближений, начальный набор должен быть выбран как можно ближе к решению, которое стремимся получить.

Для одночастичного состояния это означает, что оно должно быть относительно стабильным, таким образом обладающим некоторыми измеримыми характеристиками и дающим хорошее приближение нулевого порядка - состояние *независимых квазичастиц*.

Полевые операторы удовлетворяют "уравнению Шредингера"

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\xi, t) = & [\mathcal{E}(\xi, t) + \mathcal{V}(\xi, t)] \psi(\xi, t) + \\ & + \int d\xi' \psi^\dagger(\xi', t) U(\xi', \xi) \psi(\xi', t) \psi(\xi, t) + \dots \end{aligned} \quad (2.1)$$

Здесь \mathcal{E} и \mathcal{V} - операторы кинетической энергии и внешнего потенциала; U описывает мгновенное взаимодействие частица-частица и т.д. Очевидно, что если базисный набор одночастичных функций выбран правильно, то основной член в этом уравнении будет одночастичным, т.е.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\xi, t) \approx [\mathcal{E}(\xi, t) + \mathcal{V}(\xi, t)] \psi(\xi, t). \quad (2.2)$$

Это математическая демонстрация того факта, что имеется система слабо взаимодействующих объектов - "квазичастиц", которые могут быть приближенно описаны уравнением (2.2). Так как отклонения от этого описания малы, то времена жизни этих объектов достаточно велики для измерения их характеристик каким-либо способом, и, поэтому, они разумно хорошо определены. Как правило, свойства квазичастиц радикально отличаются от свойств свободных частиц, уже благодаря присутствию \mathcal{V} -члена в (2.2). Рассмотрим этот пункт более детально.

Например, когда рассматриваются свойства электронов в металле, то разумное первое приближение заключается в принятии во внимание периодического потенциала кристаллической решетки, пренебрегая пока как электрон-электронным взаимодействием, так и "незамерзанием" ионов в их равновесных положениях. Даже в этом грубом приближении свойства этих "квазиэлектронов" сильно отличаются от свойств электрона в квантовой электродинамике с массой $9,109 \cdot 10^{-28}$ г, электрическим зарядом $-4,8 \cdot 10^{-10}$ СГСЭ_q. Масса "квазиэлектрона" обычно анизотропна и может быть значительно больше или меньше приведенной выше величины, заряд его может стать положительным, а импульс более не сохраняется вследствие процессов переброса!

С другой стороны, когда рассматриваются свойства кристаллической решетки именно этого металла, выполняется квантование движения ионов и переход к концепции *фононов*. Это тоже квазичастицы, поскольку вне решетки фононы просто не существуют. Они взаимодействуют с электронами и друг с другом посредством слагаемых в гамильтониане, представленных во второй строчке уравнения (2.1).

Конечно, оптимальная цель заключается в учете всех этих слагаемых в (2.1). Тогда будем иметь некоторые другие объекты, подчиняющиеся уравнениям типа (2.2) без какого-либо дополнительного взаимодействия, и они будут действительными квазичастицами в рассматриваемой системе.

Здесь нет противоречия. Взаимодействия "одевают" голую частицу, делая из нее квазичастицу. Это можно сделать в два приема: первый шаг (правильный выбор базисного набора одночастичных состояний) делается без указания какой-либо теории возмущений и обычно основан на соображениях симметрии (или обычного физического смысла); так, когда трансляционная симметрия кристаллической решетки вынуждает описывать по-другому свободные электроны в терминах блоховских функций вместо простых плоских волн, и используется концепция фононов как более адекватное описание низкоэнергетической динамики ионов. Однажды выбранный, этот набор состояний ("базисные квазичастицы") играет именно ту же самую роль, как состояния свободных частиц в отсутствии внешнего потенциала, и эти два набора состояний имеют много общего, например, они живут бесконечно долго (поскольку по определению они имеют определенную энергию, $E\varphi_i = E_i\varphi_i$). Если имеем дело с "жидкостью" взаимодействующих фермионов на однородном фоне, то наиболее естественный выбор "базисных квазичастиц" есть *реальные* частицы. Поэтому позднее будем называть их просто "частицами", резервируя термин "квазичастицы" (или "элементарные возбуждения") для частиц, "одетых" вследствие взаимодействия с другими частицами (предположение о том, что описание ферми-жидкости может быть основано на картине слабо взаимодействующего газа таких квазифермионов, лежит в основе феноменологической теории Ландау).

Обратимся к построению такой теории в многочастичном случае. Начнем с рассмотрения однокомпонентной нормальной, однородной ферми- или бозе-системы при нулевой температуре. Это самый простой возможный и практически важный случай, так как он не включает сверхтекучий (сверхпроводящий) конденсат. В ферми-случае, это рассмотрение применяется к несверхпроводящим металлам и сплавам - если забыть на время о тонкостях зонной структуры. Щелочные металлы являются особенно хорошими объектами.

В бозе-случае, примеры представляют, как кажется, чисто академический интерес (т.к. бозоны должны испытывать бозе-конденсацию при нулевой температуре), но есть по крайней мере одна практически важная система бозонов, которая не испыты-

вает конденсации - это фононы (число фононов переменнo, оно само определяется из условий теплового равновесия; то, что число фононов непостоянно, не существенно, когда используется большое каноническое распределение).

Ранее был введен одночастичный пропагатор

$$K(x, t; x', t') = \langle x | S(t, t') | x' \rangle = \langle x t | x' t' \rangle$$

как амплитуда перехода частицы из точки (x', t') в (x, t) . Прямое обобщение последнего выражения есть матричный элемент N -частичного S -оператора $\langle \Phi | S(t, t') | \Phi \rangle$. К сожалению, он бесполезен, поскольку включает амплитуду перехода для $N \approx 10^{23}$ частиц. С другой стороны, одночастичный пропагатор в последнем виде предполагает, что необходимо смотреть на два состояния с одной возбужденной частицей,

$$\begin{aligned} |x, t\rangle_{state} &\equiv \hat{\dagger}(x, t) |state\rangle, \\ |x', t'\rangle_{state} &\equiv \hat{\dagger}(x', t') |state\rangle \end{aligned}$$

(здесь гейзенберговский полевой оператор $\hat{\dagger}(x, t)$ создает частицу в данной точке), и введем функцию Грина как их перекрывание

$$\text{функция Грина} \implies \langle state | \psi(x, t) \psi^\dagger(x', t') | state \rangle.$$

Конечно, необходимо усреднить по состояниям многочастичной системы, на которые действуют полевые операторы, с тем, чтобы избавиться от немакроскопических переменных, за исключением двух координат и моментов времени, между которыми движется квазичастица. Такое усреднение оператора A (как квантовомеханическое, так и статистическое) выполняется взятием его следа со статистическим оператором (матрицей плотности) системы ρ :

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A).$$

Сейчас вышеприведенная формула действительно смотрится как пропагатор, описывающий процесс, когда к системе N тождественных фермионов добавляется одна дополнительная частица, распространяющаяся от (x', t') к (x, t) , а затем она убирается. Это хорошая проба взаимодействий частица-частица в системе. Другой выбор заключался бы вначале в убирании частицы, затем в распространении дырки, и, наконец, в заполнении дырки путем возвращения частицы.

$$\begin{aligned} \text{Первый выбор} &\implies \langle \psi(x, t) \psi^\dagger(x', t') \rangle, \\ \text{Второй выбор} &\implies \langle \hat{\dagger}(x', t') \psi(x, t) \rangle. \end{aligned}$$

Тогда одночастичная причинная функция Грина, описывающая оба процесса, может быть определена следующим выражением

$$\begin{aligned} G_{\sigma\sigma'}(x, t; x', t') &= -i \langle \psi_\sigma(x, t) \psi_{\sigma'}^\dagger(x', t') \rangle \Theta(t - t') \\ &\pm i \langle \hat{\dagger}_{\sigma'}(x', t') \psi_\sigma(x, t) \rangle \Theta(t' - t) \equiv -i \langle T \psi_\sigma(x, t) \psi_{\sigma'}^\dagger(x', t') \rangle. \end{aligned} \quad (2.3)$$

От хронологического оператора Дайсона переходим к хронологическому оператору Вика T - оператору временного упорядочивания, который учитывает, что при перестановке двух фермиевских операторов происходит смена знака. Здесь спиновые

индексы указаны явно. Они могут иметь два значения (вверх и вниз) для фермионов и только одно для бозонов. Отметим, что можно показать [2], что неважно, каков спин реальных фермионов, основные квазичастицы будут иметь спин $1/2$.

Усреднение есть линейная операция. Используя это свойство, можно применить оператор дифференцирования по времени $\partial/\partial t$ к $\text{Tr} \psi_\sigma(x, t) \psi_\sigma^\dagger(x', t')$, усреднить и получить:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} G_{\alpha\beta}(x_1, t_1; x_2, t_2) &= [\mathcal{E}(x_1, t_1) + \mathcal{V}(x_1, t_1)] G_{\alpha\beta}(x_1, t_1; x_2, t_2) - \\ &\quad i \int dx_3 U(x_3, x_1) \left\langle \text{Tr} \psi_\gamma^\dagger(x_3, t_1) \psi_\gamma(x_3, t_1) \psi_\alpha(x_1, t_1) \psi_\beta^\dagger(x_2, t_2) \right\rangle + \\ &\quad \dots + \hbar \delta(x_1 - x_2) \delta(t_1 - t_2). \end{aligned}$$

Видно, что одночастичная функция Грина для многочастичной системы, определенная выше, не есть гриновская функция в математическом смысле. Она есть решение этого дифференциального уравнения. Но оно не является замкнутым уравнением для функции Грина, так как содержит средние от четырех и более полевых операторов (двухчастичную, трехчастичную и т.д. функции Грина). Таким образом, это только первое уравнение в квантовой аналогии хорошо известной бесконечной цепочки уравнений ББКГИ (Борна-Боголюбова-Кирквуда-Грина-Ивона) в классической статической механике. Эта цепочка состоит из связанных (зацепляющихся) уравнений движения для классических n -частичных функций распределения (см., например, [8]). Как и в классическом случае, обрыв этой цепочки приводит к нелинейному дифференциальному уравнению для функции Грина, в отличие от линейного уравнения

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] K(x, t; x', t') = i\hbar \delta(x - x') \delta(t - t'),$$

которое определяет поведение одночастичного пропагатора $K(x, t; x', t')$.

В равновесии, процедура усреднения наиболее легко проводится с использованием канонического или большого канонического ансамбля (распределения). Математически эти два ансамбля отражают различные выборы независимых переменных: T, V, N и T, V, μ (T - температура, V - объем, N - число частиц, μ - химический потенциал). Физическое различие состоит в том, что в первом случае система может обмениваться только энергией с окружением (термостатом), а во втором случае также и частицами; среднее число частиц фиксируется химическим потенциалом, а температура фиксирует среднюю кинетическую энергию в обоих случаях.

Статистические операторы имеют гиббсовскую форму:

$$\hat{\rho}_{\text{КР}} = \exp [\beta (F - H)]$$

или

$$\hat{\rho}_{\text{БКР}} = \exp [\beta (\Omega - H')].$$

Здесь $\beta = 1/T$ (T - температура в энергетических единицах), $F = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} (\exp [-\beta H])$ - свободная энергия, $H' = H - \mu N$, N - оператор числа частиц, $\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} (\exp [-\beta H']) = -pV$ - большой термодинамический потенциал ($-\mu N$ очевидно коммутирует с H'). Поэтому можно ввести представления Гейзенберга и взаимодействия, используя H' вместо H , и прийти к тем же самым результатам с единственным различием в соответствующих собственных значениях гамильтониана.

В термодинамическом пределе оба подхода эквивалентны. Ситуация может меняться, когда размер рассматриваемой системы становится достаточно малым, так что флуктуациями числа частиц нельзя пренебречь, и эти два ансамбля описывают *физически* различные системы (такие как изолированная проводящая гранула и она же, но присоединенная к массивным проводникам перемычками). Пока не будем рассматривать такие ситуации. Так как с большим каноническим ансамблем работать удобнее (не надо следить за постоянством числа частиц), в дальнейшем будем использовать именно его. Для упрощения обозначений и формул опустим штрих в H' и положим $\hbar = 1$.

Сейчас гамильтониан имеет полный набор собственных состояний $|n\rangle$ с собственными величинами $E'_n = E_n - \mu N_n$, где N_n - число частиц в состоянии $|n\rangle$. Среднее от упорядоченного во времени произведения двух полевых операторов в представлении Гейзенберга может быть сейчас записано как

$$\begin{aligned} \langle T \psi(t_1) \psi^\dagger(t_2) \rangle &= \text{Tr} (\exp (\beta (\Omega - H)) T \psi(t_1) \psi^\dagger(t_2)) = \\ &= \sum_{n,m} \langle n | \exp (\beta (\Omega - H)) | m \rangle \langle m | T \psi(t_1) \psi^\dagger(t_2) | n \rangle \langle m | m \rangle^{-1} \langle n | n \rangle^{-1} \\ &= \sum_n \exp (\beta (\Omega - (E_n - \mu N_n))) \langle n | T \psi(t_1) \psi^\dagger(t_2) | n \rangle \langle n | n \rangle^{-1} \\ &= \frac{\sum_n \exp (-\beta (E_n - \mu N_n)) \langle n | T \psi(t_1) \psi^\dagger(t_2) | n \rangle \langle n | n \rangle^{-1}}{\sum_n \exp (-\beta (E_n - \mu N_n))}. \end{aligned}$$

Был использован стандартный прием вставки полного набора состояний, не нормированных на единицу.

При нулевой температуре ($\beta \rightarrow \infty$) получаем

$$G_{\alpha\beta}(x_1, t_1; x_2, t_2) = -i \frac{\langle 0 | T \psi_\alpha(x_1, t_1) \psi_\beta^\dagger(x_2, t_2) | 0 \rangle}{\langle 0 | 0 \rangle}. \quad (2.4)$$

Здесь $|0\rangle$ есть точное основное состояние системы в представлении Гейзенберга - оно не зависит от времени и включает все эффекты взаимодействия.

В однородной и изотропной системе, находящейся в стационарном состоянии, функция Грина может зависеть только от разностей координат и времен:

$$G_{\alpha\beta}(x_1, t_1; x_2, t_2) = G_{\alpha\beta}(x_1 - x_2, t_1 - t_2).$$

Если, кроме того, система магнитно не упорядочена и не помещена во внешнее магнитное поле, то спиновая зависимость сводится к единичной матрице (в противном случае было бы выделенное направление в пространстве - ось спинового квантования)

$$G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} G, \quad G = \frac{1}{2} \text{Tr} G_{\alpha\beta}.$$

2.1.1 Невозмущенные функции Грина

Вычислим невозмущенные функции Грина напрямую, исходя из определения. Для фермионов

$$G^0(x, t) = \frac{1}{i} \langle T \psi(x, t) \psi^\dagger(0, 0) \rangle_0.$$

Разлагая полевые операторы по базису плоских волн (собственных функций оператора импульса),

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)t),$$

и принимая во внимание, что при нулевой температуре равновесное среднее

$$\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} \rangle_0 = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Theta(\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}),$$

находим, что

$$G^0(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{iV} \sum_{\mathbf{k}} [\Theta(t) [1 - \Theta(\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}})] - \Theta(-t) \Theta(\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}})] \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)t). \quad (2.5)$$

Фурье-преобразование этого выражения дает окончательно

$$G^0(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{\omega - (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu) + i0 \operatorname{sgn}(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} = \frac{1}{\omega - (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu) + i0 \operatorname{sgn}(\omega)}. \quad (2.6)$$

Инфинитезимальный член в знаменателе учитывает, в какой полуплоскости комплексной частоты соответствующие интегралы будут сходиться, точно так же, как

ранее при рассмотрении запаздывающего пропагатора. Например, интеграл $\int_0^\infty dt \exp(i\omega t)$

вследствие первого члена в (2.5) сходится, если $\operatorname{Im} \omega \rightarrow +0$. Здесь различие заключается в том, что имеем причинную функцию Грина, которая содержит как $\Theta(t)$, так и $\Theta(-t)$.

Можно вычислить выражение для невозмущенной функции Грина фононов, определяемой как

$$D^0(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -i \langle T \varphi(\mathbf{x}, t) \varphi(\mathbf{x}', t') \rangle_0,$$

где фононный полевой оператор $\varphi(\mathbf{x}, t)$ есть:

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2} \right)^{1/2} \left[b_{\mathbf{k}} \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t)) + b_{\mathbf{k}}^\dagger \exp(-i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t)) \right],$$

а $b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}^\dagger$ - обычные бозевские операторы. Так как фононное поле есть, в конце концов, квантованная звуковая волна, оно должно быть эрмитовым, чтобы дать в классическом пределе классическую наблюдаемую, а именно смещение среды. Тогда

$$\begin{aligned} D^0(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{iV} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2} [\Theta(t) \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t)) + \Theta(-t) \exp(-i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}}t))], \\ D^0(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2 + i0}. \end{aligned}$$

Невозмущенная функция Грина есть функция Грина в математическом смысле. Например, для фермионов она удовлетворяет линейному уравнению

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \mathcal{E}(x_1) \right] G_{\alpha\beta}^0(x_1, t_1; x_2, t_2) = \delta(x_1 - x_2) \delta(t_1 - t_2).$$

Символически (в операторном виде) это может быть переписано как

$$(G^0)^{-1}(1) G^0(1, 2) = I(1, 2),$$

где оператор $(G^0)^{-1}$ в координатном пространстве есть $\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} - \mathcal{E}(\nabla_{\mathbf{x}_1}) \right]$, а в импульсном пространстве $[\omega - \mathcal{E}(\mathbf{k})]$.

2.2 Аналитические свойства функций Грина

При рассмотрении одной частицы выяснили, что некоторые важные свойства пропагаторов могут быть получены из общих физических соображений независимо от деталей системы.

То же самое можно проделать и в многочастичной задаче. Для этого получим в дальнейшем представление Челлена-Лемана для функций Грина в импульсном пространстве (как функцию \mathbf{p}, ω), которое определяет аналитические свойства функции Грина на комплексной ω плоскости и приводит к физически значимым следствиям.

Единственное предположение заключается в том, что система находится в однородном и стационарном состоянии, другими словами, является пространственно-временным инвариантом. Это означает, что

- (1) полный гамильтониан H не зависит от времени,
- (2) оператор импульса P коммутирует с гамильтонианом (тогда полный импульс сохраняется по определению). Здесь

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \int d^3x \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) (-i\nabla) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}).$$

Легко получить, что для одновременного коммутатора

$$[\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, t), \mathbf{P}] = -i\nabla \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \quad (2.7)$$

как для фермиевских, так и бозевских полевых операторов. Достаточно подставить определение \mathbf{P} и использовать канонические (анти)коммутационные соотношения. Это уравнение похоже на гейзенберговское уравнение движения для полевого оператора

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), H_H(t)] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_H(t),$$

и они вместе дают

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, t) &= \exp[-i(\mathbf{P}\mathbf{x} - Ht)] \psi_{\alpha} \exp[i(\mathbf{P}\mathbf{x} - Ht)]; \\ \psi_{\alpha} &\equiv \psi_{\alpha}(0, 0). \end{aligned}$$

На более формальном языке, гамильтониан и оператор полного импульса являются генераторами временного и пространственного сдвигов соответственно. Это выражение подставляем в выражение для функции Грина, затем вставляем единичный

оператор, построенный на полном наборе общих собственных состояний двух коммутирующих операторов H и \mathbf{P} ,

$$I = \sum_s |s\rangle \langle s|,$$

везде, где это кажется разумным. Последующие преобразования являются прямыми вычислениями:

$$\begin{aligned} \langle 0 | T \psi(x, t) \psi^\dagger(x', t') | 0 \rangle &= \Theta(t - t') \sum_s \langle 0 | \psi(x, t) | s \rangle \langle s | \psi^\dagger(x', t') | 0 \rangle \\ &\quad \mp \Theta(t' - t) \sum_s \langle 0 | \psi^\dagger(x', t') | s \rangle \langle s | \psi(x, t) | 0 \rangle \\ &= \Theta(t - t') \sum_s \langle 0 | \exp[-i(\mathbf{P}\mathbf{x} - Ht)] \psi \times \\ &\quad \exp[i(\mathbf{P}\mathbf{x} - Ht)] | s \rangle \times \\ &\quad \langle s | \exp[-i(\mathbf{P}\mathbf{x}' - Ht')] \psi^\dagger \exp[i(\mathbf{P}\mathbf{x}' - Ht')] | 0 \rangle \\ &\quad \mp \Theta(t' - t) \sum_s \langle 0 | \exp[-i(\mathbf{P}\mathbf{x}' - Ht')] \psi^\dagger \times \\ &\quad \exp[i(\mathbf{P}\mathbf{x}' - Ht')] | s \rangle \times \\ &\quad \langle s | \exp[-i(\mathbf{P}\mathbf{x} - Ht)] \psi \exp[i(\mathbf{P}\mathbf{x} - Ht)] | 0 \rangle \\ &= \Theta(t - t') \sum_s \exp[i(E_0 - \mu N_0)t] \langle 0 | \psi | s \rangle \times \\ &\quad \exp[-i[(E_s - \mu N_s)t - \mathbf{P}_s \mathbf{x}]] \times \\ &\quad \exp[i[(E_s - \mu N_s)t' - \mathbf{P}_s \mathbf{x}']] \langle s | \psi^\dagger | 0 \rangle \times \\ &\quad \exp[-i(E_0 - \mu N_0)t'] \\ &\quad \mp \Theta(t' - t) \sum_s \exp[i(E_0 - \mu N_0)t'] \langle 0 | \psi^\dagger | s \rangle \times \\ &\quad \exp[-i[(E_s - \mu N_s)t' - \mathbf{P}_s \mathbf{x}']] \times \\ &\quad \exp[i[(E_s - \mu N_s)t - \mathbf{P}_s \mathbf{x}]] \langle s | \psi | 0 \rangle \times \\ &\quad \exp[-i(E_0 - \mu N_0)t]. \end{aligned}$$

Импульс состояния $|0\rangle$ \mathbf{P}_0 равен 0. Экспоненты с энергиями содержат некоторую тонкость. Так как полевые операторы создают или уничтожают частицы в некоторый момент времени, то в первой части этого выражения, которое содержит $\langle 0 | \psi | s \rangle \langle s | \psi^\dagger | 0 \rangle \equiv |\langle 0 | \psi | s \rangle|^2$, состояния $|s\rangle$ отвечают состоянию с числом частиц на единицу больше, чем в состоянии $|0\rangle$, $N_s = N_0 + 1 \equiv N + 1$ (в противном случае оператору уничтожения нечего уничтожать). С другой стороны, во второй части выражения, которое содержит $\langle 0 | \psi^\dagger | s \rangle \langle s | \psi | 0 \rangle \equiv |\langle s | \psi | 0 \rangle|^2$, состояния $|s\rangle$ содержат $N - 1$ частицу. Так как, в общем случае, собственные значения гамильтониана зависят от числа частиц как через член $-\mu N$, так и непосредственно, то в показателях экспонент имеем:

$$E - \mu N \equiv E(N) - \mu N.$$

Собираем показатели экспонент в этих двух частях:

$$\begin{aligned}
& (E_0(N) - \mu N) t - (E_s(N+1) - \mu(N+1)) t - \mathbf{P}_s \mathbf{x} + \\
& (E_s(N+1) - \mu(N+1)) t' - \mathbf{P}_s \mathbf{x}' - (E_0(N) - \mu N) t' \\
& = [E_0(N) - E_s(N+1) + \mu] (t - t') + \mathbf{P}_s (\mathbf{x} - \mathbf{x}'); \\
& (E_0(N) - \mu N) t' - (E_s(N-1) - \mu(N-1)) t' - \mathbf{P}_s \mathbf{x}' + \\
& (E_s(N-1) - \mu(N-1)) t - \mathbf{P}_s \mathbf{x} - (E_0(N) - \mu N) t \\
& = [E_0(N) - E_s(N-1) - \mu] (t' - t) + \mathbf{P}_s (\mathbf{x}' - \mathbf{x}).
\end{aligned}$$

Как и ожидалось, зависимость только от разностей координат и времен.

Энергии возбуждения обозначим как

$$\begin{aligned}
\varepsilon_s^{(+)} &= E_s(N+1) - E_0(N), \\
\varepsilon_s^{(-)} &= E_0(N) - E_s(N-1).
\end{aligned}$$

Очевидно, что первая дает изменение энергии, когда частица добавляется к состоянию $|s\rangle$; вторая - когда частица удаляется из состояния $|s\rangle$.

Покажем, что $\varepsilon_s^{(+)} > \mu$, а $\varepsilon_s^{(-)} < \mu$.

$$\begin{aligned}
\varepsilon_s^{(+)} &= E_s(N+1) - E_0(N+1) + E_0(N+1) - E_0(N) = \varepsilon_s + \mu, \\
\varepsilon_s^{(-)} &= E_0(N) - E_0(N-1) + E_0(N-1) - E_s(N-1) \approx \mu' - \varepsilon'_s, \\
\mu' &\approx \mu, \varepsilon'_s \approx \varepsilon_s \text{ (погрешность } \sim 1/N).
\end{aligned}$$

Сейчас обсудим все детали рассматриваемой системы, для чего введем

$$\begin{aligned}
A_s &= \left[\frac{1}{2} \right] \langle 0|0 \rangle^{-1} \left[\sum_{\alpha} \right] |\langle 0|\psi|s \rangle|^2, \\
B_s &= \left[\frac{1}{2} \right] \langle 0|0 \rangle^{-1} \left[\sum_{\alpha} \right] |\langle s|\psi|0 \rangle|^2,
\end{aligned}$$

где операции в скобках зарезервированы для спиновых степеней свободы α . A_s и B_s есть некоторые функции только индекса s . Поэтому можно легко выполнить фурье-преобразование функции Грина, используя вышеприведенные результаты, и получить представление Челлена-Лемана:

$$G(\mathbf{p}, \omega) = (2\pi)^3 \sum_s \left[\frac{A_s \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_s)}{\omega - \varepsilon_s^{(+)} + \mu + i0} \pm \frac{B_s \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_s)}{\omega - \varepsilon_s^{(-)} + \mu - i0} \right]. \quad (2.8)$$

В этом выражении δ -функции импульса происходят от экспоненциальных множителей $\exp(i\mathbf{P}_s \mathbf{x})$; они указывают величины импульса, соответствующие одночастичным возбуждениям. Важно отметить, что второй член в этом выражении явно определяет дырки с импульсами $-\mathbf{P}_s$ и энергиями $\varepsilon_s^{(-)}$. Частотные знаменатели содержат инфинитезимальные $\pm i0$ из-за присутствия Θ -функций времени в исходных выражениях точно так же, как и в случае вычисления невозмущенных функций Грина. Естественно, что этот результат согласуется с полученными ранее выражениями для $G^0(\mathbf{p}, \omega)$ и $D^0(\mathbf{k}, \omega)$. Математически представление Челлена-Лемана означает, что функция

Грина конечной системы есть мероморфная функция комплексной переменной ω , все её сингулярности есть простые полюсы (мероморфная функция - функция комплексной переменной z , которую можно представить в виде частного двух целых функций, т.е. частного сумм двух сходящихся на всей комплексной плоскости степенных рядов; она - аналитическая функция комплексного переменного z , не имеющая других конечных особых точек, кроме полюсов; в любой ограниченной области комплексной плоскости мероморфная функция имеет лишь конечное число полюсов). Каждый полюс соответствует определенной энергии возбуждения $\varepsilon_s^{(\pm)}$ и определенному импульсу системы $\pm \mathbf{P}_s$. Полюсы инфинитезимально сдвинуты в нижнюю (верхнюю) полуплоскость, когда $\omega > 0$ ($\omega < 0$). Таким образом, причинная функция Грина не является аналитической ни в какой полуплоскости.

В термодинамическом пределе ($N, V \rightarrow \infty, N/V = \text{const}$) более удобно использовать дифференциальную форму выражения (2.8):

$$G(\mathbf{p}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \left[\frac{\rho_A(\mathbf{p}, \omega')}{\omega' - \omega - i0} + \frac{\rho_B(\mathbf{p}, \omega')}{\omega' - \omega + i0} \right], \quad (2.9)$$

где

$$\begin{aligned} \rho_A(\mathbf{p}, \omega') &= -\pi(2\pi)^3 \sum_s A_s \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_s) \delta(\omega' - \varepsilon_s^{(+)} + \mu), \\ \rho_B(\mathbf{p}, \omega') &= \mp \pi(2\pi)^3 \sum_s B_s \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_s) \delta(\omega' - \varepsilon_s^{(-)} + \mu). \end{aligned}$$

Действительно, в этом пределе можно более не различать индивидуальные уровни $\varepsilon_s^{(\pm)}$. Плотности $\rho_{A,B}(\mathbf{p}, \omega')$ становятся непрерывными функциями, равными нулю при отрицательных (положительных) частотах на действительной оси; последнее становится *обрезанием ветвей* в комплексной ω -плоскости.

Реальная и мнимая части функции Грина (для *реальных* частот) могут быть легко получены из (2.8) с использованием формулы Сохоцкого-Веерштрасса

$$\frac{1}{x \pm i0} = \text{P} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x).$$

Здесь P означает главное значение. Это выражение должно пониматься как *обобщенная функция*; то есть приведенная формула, строго говоря, имеет смысл только под интегралом (свертка обобщенной функции с другой функцией) с интегрируемой функцией $F(x)$:

$$\int dx F(x) \frac{1}{x \pm i0} = \text{P} \int dx \frac{F(x)}{x} \mp i\pi F(0). \quad (2.10)$$

Главное значение (the principal value) интеграла $\text{P} \int dx \frac{F(x)}{x}$ определяется как

$$\text{P} \int dx \frac{F(x)}{x} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-\varepsilon}^{-\varepsilon} dx \frac{F(x)}{x} + \int_{\varepsilon}^{\varepsilon} dx \frac{F(x)}{x} \right].$$

Второй член возникает от обхода полюса $x = -i0$ (или $x = i0$) по полуокружности сверху (или снизу).

Используя (2.10), найдем

$$\begin{aligned}\operatorname{Re} G(\mathbf{p}, \omega) &= (2\pi)^3 \sum_s \mathcal{P} \left[\frac{A_s \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_s)}{\omega - \varepsilon_s^{(+)} + \mu} \pm \frac{B_s \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_s)}{\omega - \varepsilon_s^{(-)} + \mu} \right], \\ \operatorname{Im} G(\mathbf{p}, \omega) &= (2\pi)^3 \pi \begin{cases} - \sum_s A_s \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_s) \delta(\omega - \varepsilon_s^{(+)} + \mu), & \omega > 0; \\ \pm \sum_s B_s \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_s) \delta(\omega - \varepsilon_s^{(-)} + \mu), & \omega < 0. \end{cases}\end{aligned}$$

Таким образом, получаем важный результат:

$$\begin{aligned}\operatorname{sgn} \operatorname{Im} G(\mathbf{p}, \omega) &= -\operatorname{sgn} \omega \text{ для ферми-систем,} \\ \operatorname{sgn} \operatorname{Im} G(\mathbf{p}, \omega) &= -1 \text{ для бозе-систем.}\end{aligned}$$

Различие отражает тот факт, что в бозе-системе нет поверхности Ферми (таким образом, “частицы” и “дырки” - это одно и то же).

Асимптотическое поведение $G(\omega)$ при $\omega \rightarrow \infty$ очень простое:

$$G(\omega) \sim \frac{1}{\omega}.$$

Чтобы показать это, отметим, что в этом пределе можно пренебречь всеми другими членами в знаменателях (2.8), так что

$$G(\mathbf{p}, \omega) \sim \frac{1}{\omega} (2\pi)^3 \sum_s [A_s \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_s) \pm B_s \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_s)].$$

Сумму можно оценить, выполняя обратное преобразование Фурье и используя каноническое (анти)коммутиационные соотношения между полевыми операторами в координатном пространстве:

$$\begin{aligned}& (2\pi)^3 \sum_s [A_s \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_s) \pm B_s \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_s)] \\ &= \sum_s \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [A_s \exp[i(\mathbf{p} - \mathbf{P}_s)(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \pm B_s \exp[i(\mathbf{p} + \mathbf{P}_s)(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \\ &= \sum_s \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\frac{1}{2} \sum_\alpha \right] \{ |\langle 0 | \psi_\alpha(0) | s \rangle|^2 \exp[i(\mathbf{p} - \mathbf{P}_s)(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \\ &\quad \pm |\langle s | \psi_\alpha(0) | 0 \rangle|^2 \exp[i(\mathbf{p} + \mathbf{P}_s)(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \} \langle 0 | 0 \rangle^{-1} \\ &= \sum_s \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left[\frac{1}{2} \sum_\alpha \right] \langle 0 | 0 \rangle^{-1} \exp[i\mathbf{p}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \times \\ &\quad \langle 0 | \psi_\alpha(\mathbf{x}, t) \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}', t) \pm \psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}', t) \psi_\alpha(\mathbf{x}, t) | 0 \rangle \\ &= 1.\end{aligned}$$

Из представления Челлена-Лемана видно, что в термодинамическом пределе остаются только те полюсы $G(\omega)$, которые соответствуют ситуации, когда вся энергия и импульс возбужденной системы могут быть приписаны одному объекту, квазичастице, с определенным законом дисперсии (т.е. есть соответствие энергия-импульс).

В противном случае, для любой энергии есть целый набор соответствующих импульсов, и полюс будет устраняться интегрированием по ним. Таким образом, закон дисперсии для квазичастицы $\omega(\mathbf{p})$ определяется уравнением

$$\frac{1}{G(\mathbf{p}, \varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} = 0. \text{ (Бонч-Бруевич В.Л., 1955 г.)}$$

2.3 Запаздывающая и опережающая функции Грина

Определим еще две функции Грина - запаздывающую (retarded) и опережающую (advanced), G^R и G^A :

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= -i \left\langle \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \pm \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \right\rangle \Theta(t - t'), \\ G_{\alpha\beta}^A(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= +i \left\langle \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \pm \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \psi_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \right\rangle \Theta(t' - t). \end{aligned}$$

Определение выбрано таким образом, чтобы гарантировать:

- 1) запаздывающая (опережающая) функция Грина есть ноль для всех отрицательных (положительных) разностей времен $t - t'$,
- 2) при $t - t' = 0$ обе функции имеют разрывность $-i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, как и причинная функция Грина.

Последнее положение легко проверить, беря производную по времени и используя канонические соотношения:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow t'} \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha\beta}^{R(A)}(t - t') &= \mp i \langle 0 | \left[\psi_{\alpha}(\mathbf{x}, t), \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \right]_{\pm} | 0 \rangle \langle 0 | 0 \rangle^{-1} (\pm \delta(t - t')) \\ &= -i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned}$$

В однородном и стационарном случае вновь имеем

$$G_{\alpha\beta}^{R(A)}(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2) = G_{\alpha\beta}^{R(A)}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, t_1 - t_2) \delta_{\alpha\beta}.$$

Невозмущенные запаздывающая и опережающая функции Грина могут быть легко найдены прямым вычислением:

$$\begin{aligned} G^{0R(A)}(\mathbf{p}, \omega) &= \frac{1}{\omega - (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu) \pm i0}, \\ D^{0R(A)}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2} \left(\frac{1}{\omega - \omega_{\mathbf{k}} \pm i0} - \frac{1}{\omega + \omega_{\mathbf{k}} \pm i0} \right) = \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2 + i0 \operatorname{sgn}(\omega)}. \end{aligned}$$

Представление Челлена-Лемана для $G^{R(A)}$ может быть получено тем же способом, что и для причинной функции Грина:

$$\begin{aligned} G^R(\mathbf{p}, \omega) &= (2\pi)^3 \sum_s \left[\frac{A_s \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_s)}{\omega - \varepsilon_s^{(+)} + \mu + i0} \pm \frac{B_s \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_s)}{\omega - \varepsilon_s^{(-)} + \mu + i0} \right], \\ G^A(\mathbf{p}, \omega) &= (2\pi)^3 \sum_s \left[\frac{A_s \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_s)}{\omega - \varepsilon_s^{(+)} + \mu - i0} \pm \frac{B_s \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_s)}{\omega - \varepsilon_s^{(-)} + \mu - i0} \right]. \end{aligned}$$

Взяв реальную и мнимую части этих выражений, получим на действительной оси

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} G^{\mathrm{R}}(\mathbf{p}, \omega) &= \operatorname{Re} G^{\mathrm{A}}(\mathbf{p}, \omega) = \operatorname{Re} G(\mathbf{p}, \omega); \\ \operatorname{Im} G^{\mathrm{R}}(\mathbf{p}, \omega) &= \operatorname{Im} G(\mathbf{p}, \omega), \omega > 0; \\ \operatorname{Im} G^{\mathrm{A}}(\mathbf{p}, \omega) &= \operatorname{Im} G(\mathbf{p}, \omega), \omega < 0; \\ G_{\alpha\beta}^{\mathrm{R}}(\mathbf{p}, \omega) &= [G_{\beta\alpha}^{\mathrm{A}}(\mathbf{p}, \omega)]^*. \end{aligned} \quad (2.11)$$

С другой стороны, запаздывающая (опережающая) функция Грина несомненно аналитическая в верхней (нижней) ω -полуплоскости. Это означает, что они являются аналитическими продолжениями причинной функции Грина от полупрямых $\omega > 0$ ($\omega < 0$) соответственно. Их аналитическое поведение, конечно, то же самое, что и у причинной функции Грина:

$$G^{\mathrm{R(A)}}(\omega) \sim \frac{1}{\omega}, |\omega| \rightarrow \infty.$$

В термодинамическом пределе, как и в (2.9), можно записать

$$G^{\mathrm{R(A)}}(\mathbf{p}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\rho(\mathbf{p}, \omega')}{\omega' - \omega \mp i0}$$

со спектральной плотностью

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{p}, \omega') &= -\pi(2\pi)^3 \sum_s [A_s \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_s) \delta(\omega' - \varepsilon_s^{(+)} + \mu) \\ &\quad \pm \sum_s B_s \delta(\mathbf{p} + \mathbf{P}_s) \delta(\omega' - \varepsilon_s^{(-)} + \mu)]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Очевидно, что

$$\rho(\mathbf{p}, \omega') = \operatorname{Im} G^{\mathrm{R}}(\mathbf{p}, \omega').$$

Из формулы (2.12) ясно, что $\rho(\mathbf{p}, \omega')$ пропорционально вероятности элементарного возбуждения с импульсом \mathbf{p} , имеющее энергию ω' . В случае отсутствия взаимодействия, т.е. когда $G = G^0$, $-\operatorname{Im} G^{\mathrm{OR}} = \pi \delta(\omega - (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu))$, потому что в отсутствии взаимодействий квазичастицы будут совпадать с "основными" частицами с законом дисперсии $\varepsilon_{\mathbf{p}}$.

2.3.1 Возбуждения квазичастиц, запаздывающие и опережающие функции Грина

Сейчас можно наглядно представить концепцию возбуждения квазичастицы и её связь с существованием изолированных полюсов функции $G(\mathbf{p}, \omega)$. Предположим, что есть такой полюс при $\omega = \Omega - i\Gamma$, $\Gamma > 0$. Это соответствует частице, добавленной в состояние \mathbf{p} . Для того, чтобы увидеть эволюцию возбуждения, созданного оператором $a_{\mathbf{p}}^{\dagger}$, вычислим гриновскую функцию в (\mathbf{p}, t) представлении

$$G(\mathbf{p}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega t) G(\mathbf{p}, \omega).$$

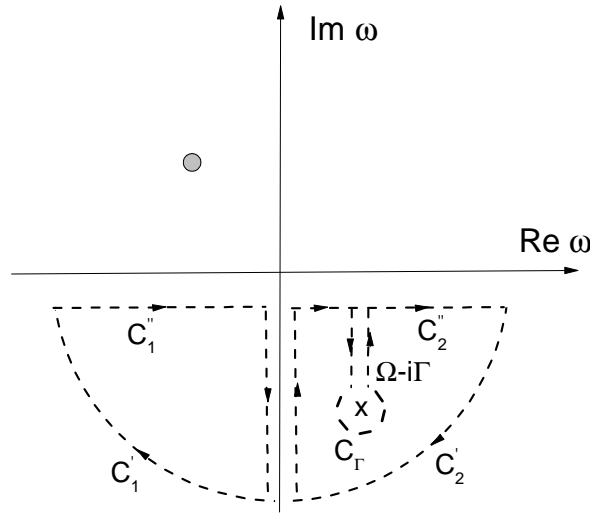


Рис. 2.1: Контуры интегрирования в плоскости комплексной частоты. Полюс $G^R(\mathbf{p}, \omega)$ обозначен крестиком, а $G^A(\mathbf{p}, \omega)$ - кружочком

Для отрицательного t контур интегрирования может быть замкнут в верхней полуплоскости, и, поскольку там нет сингулярностей, интеграл равен нулю. Для положительного t контур замыкается в нижней полуплоскости и будет содержать полюс. Мы не можем, однако, просто вычислить вычет, так как причинная функция Грина не аналитична в нижней полуплоскости. Необходимо заменить её аналитическими продолжениями, $G^{R(A)}$. С тем, чтобы сделать это, замыкаем контур следующим образом (см. рис. 2.1).

Для $\text{Re } \omega < 0$ можно заменить $G(\mathbf{p}, \omega)$ на $G^A(\mathbf{p}, \omega)$, и для $\text{Re } \omega > 0$ на $G^R(\mathbf{p}, \omega)$. Сейчас, согласно теореме Коши комплексного анализа, интересующий нас интеграл может быть записан в виде:

$$G(\mathbf{p}, t) = - \int_{C_1 + C_2'} \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega t) G^A(\mathbf{p}, \omega) - \int_{C_2'' + C_2' + C_\Gamma} \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega t) G^R(\mathbf{p}, \omega).$$

Лемма Жордана вместе с $\frac{1}{\omega}$ асимптотикой гриновских функций обеспечивает то, что интегралы по бесконечно удаленным четвертям окружностей C_1' и C_2' равны нулю. Остаются два члена: вклад от полюса и интеграл вдоль отрицательной мнимой оси:

$$G(\mathbf{p}, t) = -iZ \exp(-i\Omega t) \exp(-\Gamma t) + \int_{-i\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega t) [G^A(\mathbf{p}, \omega) - G^R(\mathbf{p}, \omega)],$$

где Z - вычет $G^R(\omega)$ в полюсе. Первый член описывает свободную квазичастицу с конечным временем жизни $\sim \frac{1}{\Gamma}$, вклад от интеграла мал, если только $\Omega t \gg 1$, $\Gamma \ll 1$. Это означает, что скорость распада должна быть достаточно мала: $\Gamma \ll \Omega$. Действи-

тельно, привлекая представление Челлена-Лемана, видим, что

$$\begin{aligned}
& \int_{-i\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega t) [G^A(\mathbf{p}, \omega) - G^R(\mathbf{p}, \omega)] \\
& \approx \int_{-i\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega t) \left[\frac{Z}{\omega - (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu) - i\Gamma} - \frac{Z}{\omega - (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu) + i\Gamma} \right] \\
& = 2i\Gamma Z \int_{-i\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega t) \frac{1}{[\omega - (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)]^2 + \Gamma^2} \\
& \approx -\frac{\Gamma Z}{\pi t} \frac{1}{(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)^2} \ll Z \exp(-i\Omega t) \exp(-\Gamma t),
\end{aligned}$$

если $\Gamma \ll (\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)$ и t не слишком большие по сравнению с $\frac{1}{\Gamma}$.

2.3.2 Соотношения Крамерса-Кронига

Из представления Челлена-Лемана для запаздывающей и опережающей функций Грина следует важное соотношение между реальной и мнимой частями этих функций *реальной* частоты - соотношения Крамерса-Кронига (дисперсионные соотношения):

$$\operatorname{Re} G^{R(A)}(\mathbf{p}, \omega) = \pm P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\operatorname{Im} G^{R(A)}(\mathbf{p}, \omega')}{\omega' - \omega}.$$

Это непосредственно следует из взятия реальной и мнимой частей. Можно показать, что основанием для справедливости этого соотношения является причинность, т.е. свойство опережающей и запаздывающей функций Грина быть нулем для $t \geq t'$. Доказательство (которое является совершенно прямым) подобно вычислению фурье-образа пропагатора, когда, во-первых, было установлено, что полюса $K(\omega)$ должны быть инфинитезимально смещены от реальной оси, с тем, чтобы обеспечить $\Theta(t)$ - подобное поведение $K(t)$. Затем, зная, что $G^{R(A)}(\omega)$ является аналитической функцией в соответствующей полуплоскости, можно вычислить интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\operatorname{Im} G^{R(A)}(\mathbf{p}, \omega')}{\omega' - \omega}$$

вдоль реальной оси, используя теорему Коши, и прийти к соотношению Крамерса-Кронига. В математике это соотношение известно как теорема Племеля (еще раньше эта теорема была доказана Сохоцким, см. С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. — М.: Наука, 1975. — 530 с.).

2.3.3 Функция Грина и наблюдаемые

Способ выражения наблюдаемых (средних величин квантомеханических операторов) через гриновскую функцию (если она известна) непосредственно следует из её определения (так как она содержит среднее только от двух полевых операторов, то ясно, что могут быть рассмотрены только одночастичные операторы).

Например, плотность числа частиц в системе (реальные или "базисные" частицы) есть по определению

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \rangle = \mp \sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}, t - 0; \mathbf{r}, t).$$

Так, для однородной системы фермионов имеем

$$n = \frac{N}{V} = -2iG_{\alpha\alpha}(\mathbf{r} = \mathbf{0}, t = -0). \quad (2.13)$$

Это соотношение между плотностью и функцией Грина позволяет, в свою очередь, выразить термодинамические параметры системы при $T = 0$ через её функцию Грина. Действительно, большой термодинамический потенциал системы

$$d\Omega = -SdT - pdV - Nd\mu = -Nd\mu,$$

где учтено, что объем постоянен, а $S = 0$ при $T = 0$. Это уравнение может быть проинтегрировано ($\Omega(\mu = 0) = 0$),

$$\Omega = \int_0^{\mu} d\mu N(\mu),$$

куда можно подставить выражение для N , учитывая, что функция Грина зависит от μ ,

$$\Omega = \int_0^{\mu} d\mu 2iV \lim_{t \rightarrow -0} \int \frac{d\mathbf{p}d\omega}{(2\pi)^4} \exp(-i\omega t) G(\mathbf{p}, \omega).$$

Несколько более сложный пример - это ток, который через полевые операторы выражается так:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{ie}{2m} \sum_{\alpha} \langle (\nabla \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r})) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) - \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) (\nabla \psi_{\alpha}(\mathbf{r})) \rangle.$$

Используя прием, известный как "расщепление волоса", можно выразить ток через функции Грина:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= \frac{ie}{2m} \sum_{\alpha} \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} (\nabla_{\mathbf{r}'} - \nabla_{\mathbf{r}}) \langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \rangle \\ &= \frac{ie}{2m} \sum_{\alpha} \lim_{t \rightarrow -0} \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} (\nabla_{\mathbf{r}'} - \nabla_{\mathbf{r}}) [\mp G_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', 0)]. \end{aligned}$$

2.4 Теория возмущений: диаграммы Фейнмана

Общие свойства функций Грина были получены на основе замечательных формул комплексного анализа и физической интуиции, которые, к сожалению, не могут дать более конкретную информацию о функциях Грина реальной системы - системы со взаимодействиями. На этом уровне обобщения все ферми-системы выглядят одинаково, и все бозе-системы выглядят одинаково (что, конечно, правильно, но несущественно). С другой стороны, невозможно исследовать различия вследствие взаимодействий, потому что нет способа определения матричных элементов полевых операторов в представлении Челлена-Лемана.

Как всегда, необходимо применить теорию возмущений. Огромным достижением Фейнмана было построение формализма теории возмущений, в котором полное разложение по возмущениям, включая его наиболее громоздкие выражения, сводится к набору всегда физически понятных диаграмм - диаграммам Фейнмана. При вычислении функции Грина системы со взаимодействиями встречаемся с обычным препятствием, а именно: не знаем состояние (волновую функцию) системы, по которому должно быть проведено усреднение. Неизвестно основное состояние $|0\rangle$. Неизвестны возбужденные состояния. Кроме того, любое приближение, которое мы собираемся делать, будет практически ортогонально соответствующему многочастичному состоянию ввиду чрезвычайно сложной структуры последнего. К счастью, приближенные *матричные элементы* (как функция Грина) могут быть совершенно точными. Кажущийся парадокс есть просто отражение того факта, что, хотя волновая функция включает все состояния частиц, гриновская функция связана только с двумя одночастичными состояниями (начальным и конечным). Как отмечал Таулес (Д. Таулес. Квантовая механика систем многих частиц. — М.: ИЛ, 1963. — 232 с.), если одночастичное состояние аппроксимировано с малой ошибкой α , то проекция соответствующего многочастичного состояния на точное состояние будет порядка $(1 - \alpha)^N \sim \exp(-N\alpha) \rightarrow 0$ при $N \rightarrow \infty$ для любого конечного α . С другой стороны, среднее одночастичного оператора (как функция Грина) будет содержать только малую ошибку α .

Можно сделать два вывода:

- 1) функции Грина обеспечивают физически чувствительный метод подступа к многочастичной проблеме,
- 2) результаты должны быть выражены в терминах средних по невозмущенному состоянию системы, поскольку это более предпочтительно по сравнению с поправками к многочастичным волновым функциям (в обычной квантовой механике оба варианта эквивалентны - это одночастичная теория).

2.4.1 Правила Фейнмана. Теоремы Вика и сокращения

Для выполнения намеченной программы обратимся к представлению взаимодействия. Ранее было показано, что это естественный способ рассмотрения теории возмущений. Полевые операторы в представлении взаимодействия будем обозначать прописными греческими буквами. Связь между ними и гейзенберговскими операторами определяется выражением:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = U^\dagger(t)\psi_S(\mathbf{x})U(t) = U^\dagger(t)\exp(-iH_0t)\Psi(\mathbf{x}, t)\exp(iH_0t)U(t).$$

Подставляя это в определение функции Грина (2.4), получаем

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= -i \left\{ \Theta(t - t') \langle 0 | U^\dagger(t) \exp(-iH_0 t) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, t) S_I(t, t') \Psi_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', t') \exp(iH_0 t') U(t') | 0 \rangle \right. \\ &\quad \mp \Theta(t' - t) \langle 0 | U^\dagger(t') \exp(-iH_0 t') \Psi_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', t') S_I(t', t) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, t) \exp(iH_0 t) U(t) | 0 \rangle \left. \right\} \\ &\quad \times [\langle 0 | U^\dagger(t) \exp(-iH_0 t) \exp(iH_0 t) U(t) | 0 \rangle]^{-1}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

В дальнейшем будем опускать индекс (I) у S -матрицы, поскольку будем использовать её только в представлении взаимодействия (1.28). Далее, $|0\rangle$ - гейзенберговский вектор основного состояния. Тогда

$$\exp(iH_0 t') U(t') |0\rangle_H = \exp(iH_0 t') |0(t')\rangle_S = |0(t')\rangle_I,$$

т.е. вектор основного состояния в представлении взаимодействия, и

$$|0(t')\rangle_I = S(t', t'') |0(t'')\rangle_I = S(t', -\infty) |0(-\infty)\rangle_I, \quad (t' > t'')$$

поскольку можно положить момент времени $t'' = -\infty$. То же самое можно проделать по отношению к

$$\langle 0 | U^\dagger(t) \exp(-iH_0 t)$$

и, в конце концов, получить

$$\begin{aligned} \exp(iH_0 t') U(t') |0\rangle &= S(t', -\infty) |0(-\infty)\rangle_I, \\ \langle 0 | U^\dagger(t) \exp(-iH_0 t) &= \langle 0(\infty) |_I S(\infty, t). \end{aligned}$$

Сейчас введем очень важную адиабатическую гипотезу. Предположим, что возмущение очень давно отсутствовало и было включено бесконечно медленным образом, например

$$W(t \leq t_1) = W \exp(\alpha(t - t_1)), \quad \alpha \rightarrow 0+.$$

Это возмущение будет выключено в очень отдаленном будущем, например, так:

$$W(t \geq t_2) = W \exp(-\alpha(t - t_2)), \quad \alpha \rightarrow 0+.$$

Здесь $[t_1, t_2]$ - временной интервал, в пределах которого исследуется система.

Конечно, физически значительно легче включить и выключить внешнее поле, такой свободы нет при рассмотрении взаимодействия частица-частица. Но ничто не запрещает априорно такое свойство возмущения в гамильтониане, а окончательно мы полагаем $\alpha = 0$ в любом случае. Выражаясь математическим языком, мы собираемся использовать так называемую регуляризацию Абеля условно сходящихся интегралов, которые появятся позднее.

Так как сейчас при $-\infty$ нет возмущения, то можно вместо $|0(-\infty)\rangle_I$ написать вектор невозмущенного основного состояния $|\Phi_0\rangle$, который от времени не зависит, так как

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Phi_0(t \rightarrow -\infty)\rangle = W \exp(\alpha(t - t_1)) |\Phi_0(t \rightarrow -\infty)\rangle \rightarrow 0.$$

Удобно выбрать нормированное состояние $\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle = 1$.

Из квантовой механики известно (Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — М.: Физматлит, 2004. — 800 с.), что если основное

состояние невырождено, и взаимодействие не приводит к перестройке основного состояния (как, например, в сверхпроводимости), то при бесконечно медленном включении взаимодействия система не переходит в другое состояние. Поэтому состояния при $\pm\infty$ отличаются лишь фазовым множителем

$$\langle 0(+\infty) |_I = \exp(iL) | \Phi_0 \rangle.$$

Тогда (2.14) может быть записано в виде

$$iG_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \frac{\langle \Phi_0 | T S(\infty, -\infty) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, t) \Psi_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', t') | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle}. \quad (2.15)$$

Здесь сокращены фазовые множители от числителя и знаменателя в (2.14), представлен член под знаком временного упорядочения с тем, чтобы собрать все части

S -оператора в $S(\infty, -\infty) = T \exp \left[-i \int_{-\infty}^{\infty} d\tau W(\tau) \right]$. Эта формула есть основа для тео-

рии возмущений: необходимо только разложить экспоненту и получить ряд (подобный тому, что был получен для одночастичного пропагатора), содержащий члены

$$\langle \Phi_0 | T W(t_1) W(t_2) \dots W(t_n) \Psi_\alpha(\mathbf{x}, t) \Psi_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', t') | \Phi_0 \rangle.$$

Различие заключается в том, что:

1) необходимы матричные элементы не между координатными (импульсными) собственными состояниями, а между векторами невозмущенного основного состояния многочастичной системы;

2) сейчас есть знаменатель $\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle$.

Теорема Вика

Это теорема квантовой теории поля. После разложения экспоненты в S -операторе необходимо вычислить матричные элементы вида

$$\langle \Phi_0 | T \varphi_1 \varphi_2 \varphi_3 \dots \varphi_m | \Phi_0 \rangle.$$

Здесь $\varphi_1 \varphi_2 \varphi_3 \dots \varphi_m$ - полевые (ферми или бозе) операторы в представлении взаимодействия, а теорема Вика позволяет вычислить такие матричные элементы.

Для краткости и ясности будем обозначать сейчас набор переменных \mathbf{x}, t, α одной цифрой или буквой. Например:

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha(\mathbf{x}, t) &\implies \Psi_X, \\ \Psi_{\gamma_1}(\mathbf{x}_1, t_1) &\implies \Psi_1, \\ \sum_\alpha \int d^3x \int dt &\implies \int dX, \\ \sum_{\gamma_1} \int d^3x_1 \int dt_1 &\implies \int d1. \end{aligned}$$

Теорема Вика утверждает, что упорядоченное по времени произведение полевых операторов в представлении взаимодействия равно сумме их нормальных произведений со всеми возможными свертками (хронологическими спариваниями):

$$\begin{aligned}
 & T(\varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_m \varphi_{m+1} \dots \varphi_n) \\
 = & N(\varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_m \varphi_{m+1} \dots \varphi_n) + N(\overbrace{\varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_m \varphi_{m+1} \dots \varphi_n}^{(1)}) \\
 & + N(\overbrace{\varphi_1 \varphi_2 \varphi_3 \dots \varphi_m \varphi_{m+1} \dots \varphi_n}^{(2)}) + \dots + \dots \\
 & + N(\overbrace{\varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_m \varphi_{m+1} \varphi_{m+2} \dots \varphi_n}^{(3)}) + \dots \\
 & + N(\overbrace{\varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_m \varphi_{m+1} \varphi_{m+2} \dots \varphi_n}^{(4)}).
 \end{aligned}$$

Некоторые определения.

Нормальное произведение (упорядочение) полевых операторов означает, что все операторы уничтожения стоят справа от операторов рождения. Под оператором уничтожения понимается оператор, который, действуя на невозмущенное основное состояние (вакуумное состояние), дает нуль, а оператор рождения является эрмитово сопряженным ему. В случае ферми-системы, т.е. когда вакуум есть заполненная сфера Ферми, операторы уничтожения есть операторы уничтожения $a_{\mathbf{p}}$ при $p > p_F$ и операторы рождения $a_{\mathbf{p}}^\dagger$ при $p < p_F$, т.е.

$$a_{\mathbf{p}} = a_{\mathbf{p}} \Theta(p - p_F) + a_{\mathbf{p}}^\dagger \Theta(p_F - p).$$

При желании можно явно разделить фермионный полевой оператор на две соответствующие части,

$$\begin{aligned}
 \Psi_X &= \Psi_X^{(-)} + \Psi_X^{(+)} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{p > p_F} a_{\mathbf{p}} \exp[i(\mathbf{p}\mathbf{x} - \varepsilon_{\mathbf{p}} t)] + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{p < p_F} a_{\mathbf{p}} \exp[i(\mathbf{p}\mathbf{x} - \varepsilon_{\mathbf{p}} t)].
 \end{aligned}$$

Бозонное (фононное) поле уже представлено в этом виде:

$$\begin{aligned}
 \varphi_X &= \varphi_X^{(-)} + \varphi_X^{(+)} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2}\right)^{1/2} b_{\mathbf{k}} \exp(i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)) + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\omega_{\mathbf{k}}}{2}\right)^{1/2} b_{\mathbf{k}}^\dagger \exp(-i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega_{\mathbf{k}} t)).
 \end{aligned}$$

Так как временное упорядочение и нормальное произведение являются дистрибутивными операциями, то можно иметь дело с частями $(-)$ или $(+)$ по отдельности, поэтому все промежуточные выкладки могут быть проделаны с самими полевыми операторами Ψ, φ .

По определению, среднее по основному состоянию нормального произведения любого набора полевых операторов A, B, C, \dots равно нулю:

$$\langle \Phi_0 | N(A, B, C, \dots) | \Phi_0 \rangle = 0.$$

Свертка или хронологическое спаривание двух операторов $\overbrace{\varphi_m \varphi_n}^{(1)}$ есть разность между их хронологизованным и нормальным произведениями:

$$\overbrace{\varphi_m \varphi_n}^{(1)} = T(\varphi_m \varphi_n) - N(\varphi_m \varphi_n).$$

Если оба оператора здесь одного сорта (оба рождения или оба уничтожения), то свертка равна нулю:

$$\begin{aligned}\overbrace{\varphi_1 \varphi_2} &= \Theta(t_1 - t_2) \varphi_1 \varphi_2 \mp \Theta(t_2 - t_1) \varphi_2 \varphi_1 - \varphi_1 \varphi_2 \\ &= [\Theta(t_1 - t_2) + \Theta(t_2 - t_1)] \varphi_1 \varphi_2 - \varphi_1 \varphi_2 = 0.\end{aligned}$$

С другой стороны, свертка сопряженных полевых операторов есть число. Принимая во внимание, что это операторы в представлении взаимодействия и их временная зависимость простая, можно, например, получить

$$\begin{aligned}\overbrace{\varphi_1^\dagger \varphi_2} &= \sum_k \sum_q \exp(iE_k t_1) \overbrace{\varphi_k^\dagger \exp(-iE_q t_2) \varphi_q} \\ &= \sum_k \sum_q \exp[i(E_k t_1 - E_q t_2)] \left[\Theta(t_1 - t_2) \varphi_k^\dagger \varphi_q \mp \Theta(t_2 - t_1) \varphi_q \varphi_k^\dagger - \varphi_k^\dagger \varphi_q \right] \\ &= \sum_k \sum_q \exp[i(E_k t_1 - E_q t_2)] \left\{ [\Theta(t_1 - t_2) + \Theta(t_2 - t_1)] \varphi_k^\dagger \varphi_q - \varphi_k^\dagger \varphi_q \right. \\ &\quad \left. \mp \Theta(t_2 - t_1) \delta_{kq} \right\} \\ &= \mp \sum_k \sum_q \exp[i(E_k t_1 - E_q t_2)] \Theta(t_2 - t_1) \delta_{kq},\end{aligned}$$

т.е. операторные члены сокращаются. Это важный результат, потому что тогда можно записать:

$$\begin{aligned}\overbrace{\varphi_1 \varphi_2^\dagger} &= \langle \Phi_0 | \overbrace{\varphi_1 \varphi_2^\dagger} | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | T(\varphi_1 \varphi_2^\dagger) | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | N(\varphi_1 \varphi_2^\dagger) | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | T(\varphi_1 \varphi_2^\dagger) | \Phi_0 \rangle = iG^0(1, 2).\end{aligned}$$

Другими словами, свертка ферми- (бозе-) операторов есть невозмущенная функция Грина, которую известно, как найти. Если бы коммутационные соотношения для полевых операторов содержали оператор вместо дельта-функции (а так обстоит дело в случае спиновых операторов), то мы не смогли бы воспользоваться теоремой Вика при вычислении средних произведения полевых операторов. Вот почему нет реально удобного диаграммного подхода к соответствующим задачам. Но для бозонов и фермионов можно использовать эту теорему для нахождения средних.

Отметим, что можно извлечь все свертки из-под символа нормального произведения. Необходимо только переставить спаренные операторы с их соседями, с тем, чтобы расположить спаренные операторы рядом, а затем просто вычислить свертку (это число!) и вынести ее за символ нормального произведения. Эта процедура дает самое наибольшее - множитель $(-1)^p$, где p - число перестановок фермиевских операторов для осуществления этой процедуры. Поэтому остается только вклад, представляющий собой сумму всех возможных полностью свернутых членов, поскольку другие члены содержат некоторые нормально упорядоченные операторы, среднее от которых по основному (вакуумному) состоянию есть нуль. Очевидно, что только члены, содержащие четное число операторов, могут быть полностью свернуты. Эта сумма, в свою очередь, есть сумма произведений невозмущенных гриновских функций, соответствующих всем возможным способам собирания пар сопряженных полевых операторов из общего множества с учетом множителя $(-1)^p$. Каждый из

этих членов может быть представлен отличительной диаграммой Фейнмана, для которых установлены правила рисования, чтения и вычисления.

Прежде чем заняться этим, проверим, что теорема Вика правдоподобна. Само доказательство этой теоремы включает довольно утомительные выкладки. Следуя Лифшицу и Питаевскому [2], будем использовать более простой аргумент, справедливый не для самих операторов, а для их матричных элементов (так называемое слабое утверждение), и только в термодинамическом пределе. С другой стороны, это будет справедливо для средних по произвольному состоянию системы (не только для основного состояния).

Запишем среднее в фурье-компонентах:

$$\begin{aligned} \langle X | \varphi_1 \varphi_2 \dots | X \rangle &= V^{-1/2} \sum_{k_1} V^{-1/2} \sum_{k_2} \dots \\ &\exp (ik_1 x_1 - iE_1 t_1) \exp (ik_2 x_2 - iE_2 t_2) \dots \langle X | c_{k_1} c_{k_2} \dots | X \rangle, \end{aligned}$$

где V - объем системы. В этом выражении должно быть четное число операторов: $N/2$ операторов рождения и $N/2$ операторов уничтожения с теми же самыми величинами k (иначе матричный элемент есть нуль). Может быть не более, чем $N/2$ различных величин k . Действительно, если все они различны, имеем

$$\begin{aligned} &V^{-N/2} \sum_{k_1} \sum_{k_2} \dots \exp [ik_1 (x_1 - x'_1) - iE_1 (t_1 - t'_1)] \dots \\ &\langle X | c_{k_1}^\dagger c_{k_1} | X \rangle \langle X | c_{k_2}^\dagger c_{k_2} | X \rangle \dots \langle X | c_{k_{N/2}}^\dagger c_{k_{N/2}} | X \rangle (-1)^p. \end{aligned}$$

Здесь можно вставить $|X\rangle \langle X|$ вместо полного выражения для единичного оператора $\sum_s |s\rangle \langle s|$, потому что оставшаяся часть его не вносит никакого вклада. Приведенное выражение есть полностью свернутый член теоремы Вика. В термодинамическом пределе $V \rightarrow \infty$ он остается конечным, так как каждая степень в нормировочном множителе компенсируется суммированием по k (оба пропорциональны числу частиц в системе).

С другой стороны, в выражении для $\langle X | \varphi_1 \varphi_2 \dots | X \rangle$ есть и другие члены, но они содержат $N/2 - 1$, $N/2 - 2$ и т.д. различных величин k , и, таким образом, столько же независимых суммирований. Вследствие этого, некоторые степени объема в знаменателе не будут сокращены суммированием, и все эти члены исчезают при термодинамическом предельном переходе, что и заключает рассуждения.

Теперь путь вычислений совершенно ясен:

1) разложить упорядоченную по времени экспоненту в выражении для функции Грина;

2) взять все средние по основному состоянию, используя теорему Вика, т.е. преобразуя все члены в произведения невозмущенных функций Грина (с соответствующими интегрированиями);

3) представить эти члены графически в виде диаграмм Фейнмана. После того, как установлено соответствие между элементами диаграмм и аналитическими членами в разложении, значительно проще работать с диаграммами, которые дают значительно более ясное понимание структуры включенных членов.

Правила рисования и чтения диаграмм Фейнмана в некоторых деталях конечно зависят от вида взаимодействия. Что хуже, они зависят от вкусов и предпочтений автора, чью статью или книгу мы читаем. Есть, по крайней мере, три известные

школы. Примем один из этих подходов, в котором время течет справа налево, и линии, символизирующие функции Грина, проводятся справа налево. В этом есть, по крайней мере, одно преимущество: порядок букв на диаграмме такой же, как и в соответствующем аналитическом выражении.

Для иллюстрации этого получим правила Фейнмана для простого случая скалярного электрон-электронного взаимодействия, которое по определению включает только один сорт частиц (электроны), взаимодействующих через мгновенный спин-независимый потенциал

$$W(t) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \int d^3x_1 d^3x_2 \Psi_{\alpha_1}^\dagger(\mathbf{x}_1, t) \Psi_{\alpha_2}^\dagger(\mathbf{x}_2, t) U(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \Psi_{\alpha_2}(\mathbf{x}_2, t) \Psi_{\alpha_1}(\mathbf{x}_1, t). \quad (2.16)$$

Для удобства введем

$$U(1-2) \equiv U(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(t_1 - t_2)$$

и будем интегрировать по пространственным и временным координатам неограниченно, а весь набор (\mathbf{x}, t, α) запишем как X .

Разлагая экспоненту в общем выражении (2.15) для $iG(X, X')$ до первого порядка по взаимодействию и подставляя скалярное электрон-электронное взаимодействие (2.16), получим

$$\begin{aligned} & iG(X, X') \\ & \approx \left[\langle \Phi_0 | T \Psi_X \Psi_{X'}^\dagger | \Phi_0 \rangle + (-i) \frac{1}{2} \int d1 d2 U(1-2) \langle \Phi_0 | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger \Psi_2 \Psi_1 \Psi_X \Psi_{X'}^\dagger | \Phi_0 \rangle \right] \\ & \times \left[1 + (-i) \frac{1}{2} \int d1 d2 U(1-2) \langle \Phi_0 | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger \Psi_2 \Psi_1 | \Phi_0 \rangle \right]^{-1}. \end{aligned}$$

Затем, с помощью теоремы Вика, можно вычислить средние шести операторов в числителе и четырех операторов в знаменателе.

Выражение $\langle \Phi_0 | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger \Psi_2 \Psi_1 \Psi_X \Psi_{X'}^\dagger | \Phi_0 \rangle$ может быть полностью свернуто шестью различными способами. Например,

$$\langle \Phi_0 | T \overbrace{\Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger \Psi_2} \overbrace{\Psi_1 \Psi_X \Psi_{X'}^\dagger} | \Phi_0 \rangle = n^0(1) n^0(2) iG^0(X, X').$$

Здесь $n^0(1) = \langle \Psi_1^\dagger \Psi_1 \rangle_0$ есть просто невозмущенная электронная плотность в системе. Как видно, в этом члене "пробная" частица (движущаяся от X' к X) не связана (отсоединена) с оставшейся частью системы, т.е. не взаимодействует с ней.

Другой пример:

$$\langle \Phi_0 | T \overbrace{\Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger \Psi_2} \overbrace{\Psi_1 \Psi_X \Psi_{X'}^\dagger} | \Phi_0 \rangle = -iG^0(1, 2) iG^0(2, 1) iG^0(X, X'),$$

также приводит к несвязанному члену со знаком минус, потому что необходимо поменять местами нечетное число операторов Ферми, чтобы получить соответствующие спаривания.

Еще один выбор дает, наконец, связанный член, где пробная частица взаимодействует с системой:

$$\langle \Phi_0 | T \overbrace{\Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger \Psi_2} \overbrace{\Psi_1 \Psi_X} \Psi_{X'}^\dagger | \Phi_0 \rangle = iG^0(X, 2) iG^0(2, 1) iG^0(1, X').$$

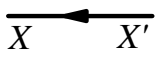
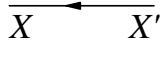

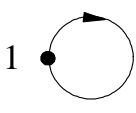
	$iG(X, X') = iG_{\alpha\alpha'}(x, t; x', t')$	Причинная функция Грина
	$iG^0(X, X') = iG^0(x-x', t-t') \delta_{\alpha\alpha'}$	Невозмущенная причинная функция Грина
	$-iU(1-2) = -iU(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(t_1 - t_2)$	Потенциал взаимодействия
	$n^0(1) = \langle \Psi_1^+ \Psi_1 \rangle_0$	Невозмущенная электронная плотность

Рис. 2.2: Правила Фейнмана для скалярного электрон-электронного взаимодействия. Предполагается интегрирование по всем промежуточным координатам и временам и суммирование по скрытым спиновым индексам

Если сопоставить элементам приведенных выше аналитических выражений графические элементы в соответствии с правилами, приведенными в таблице (рис. 2.2), то можно нарисовать функцию Грина до первого порядка по взаимодействию следующим образом (рис. 2.3).

Результирующие диаграммы подобны диаграммам, которые были получены ранее для одночастичного пропагатора. А именно, пробная частица взаимодействует с частицами в системе и движется свободно между этими актами рассеяния. Но сейчас частицы "фона" взаимодействуют друг с другом, и это отражено в структуре диаграмм, которые сейчас намного богаче.

Видно, что первые два члена в числителе содержат несвязанные части. С другой стороны, остающиеся четыре члена содержат связанные части, и они показывают, что пробная частица рассеивается, т.е. взаимодействует с другими частицами в системе.

По определению связанные диаграммы есть диаграммы, которые не содержат частей, не связанных с внешними концами, т.е. с координатами "внешней" частицы (X и X'). Только внешние концы диаграммы несут важные координаты (спины и т.д.); координаты, которые действительно появляются как аргументы точной функции Грина, которую необходимо вычислить. Все оставшиеся координаты являются фиктивными индексами, поскольку по ним будет произведено интегрирование (суммирование). Конечно, неважно, как обозначается промежуточная переменная, и все диаграммы, которые отличаются только промежуточными индексами, представляют собой одно и то же.

Видно, что связанные члены содержат интегрирования по промежуточным переменным 1 и 2. Поэтому четыре связанных члена соответствуют только двум различным, и можно избавиться от множителя $\frac{1}{2}$ перед ними. Раскладывая знаменатель, находим,

$$\begin{aligned}
 \text{---} \approx & \frac{\left[\text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \right] \left[1 + \frac{1}{2} \text{---} \text{---} + \frac{1}{2} \text{---} \text{---} \right]}{1 + \frac{1}{2} \text{---} \text{---} + \frac{1}{2} \text{---} \text{---}} = \\
 = & \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---}
 \end{aligned}$$

Рис. 2.3: Функция Грина до первого порядка включительно для скалярного электрон-электронного взаимодействия

что

$$\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle \approx 1 + \frac{1}{2} \text{---} \text{---} + \frac{1}{2} \text{---} \text{---}$$

В пределах той же точности можно представить числитель в виде произведения (пренебрегая членами более высокого порядка по взаимодействию) и увидеть, что знаменатель действительно сокращается с несвязными членами из числителя.

Это наблюдение есть на самом деле строгое математическое положение и составляет содержание следующей теоремы.

Теорема о связности (теорема сокращения)

Все несвязные диаграммы, появляющиеся в ряду по возмущению для функции Грина, точно сокращаются из числителя и знаменателя. Поэтому функция Грина выражается суммой всех связных диаграмм.

Нет необходимости конкретизировать взаимодействие W . Рассмотрим член ν -того порядка в числителе функции Грина:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \delta_{m+n, \nu} (-i)^{m+n} \frac{1}{\nu!} \left(\frac{\nu!}{m!n!} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots dt_m \langle \Phi_0 | T W(t_1) \cdots W(t_m) \Psi_X \Psi_{X'}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle_{\text{св}} \\
 & \times \int_{-\infty}^{\infty} dt_{m+1} \cdots dt_{\nu} \langle \Phi_0 | T W(t_{m+1}) \cdots W(t_{m+n}) | \Phi_0 \rangle.
 \end{aligned}$$

В этом выражении каждый член представлен явно в виде произведения связной части m -того порядка и несвязной части n -того порядка; $m+n$ в сумме дают ν . Здесь включен комбинаторный множитель $\frac{\nu!}{m!n!}$, равный числу способов распределения ν

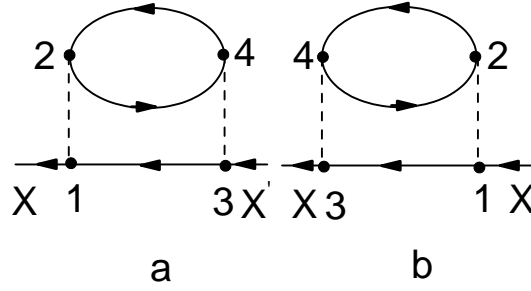


Рис. 2.4: Пример топологически эквивалентных диаграмм

операторов взаимодействия $W(t_i)$ по этим двум группам, связным и несвязным. Так как оператор взаимодействия содержит четное число операторов Ферми, то от такого перераспределения не происходит смена знака. Этот множитель умножается на $\frac{1}{\nu!}$ от разложения экспоненты, что приводит к $\frac{1}{m!n!}$.

Суммирование по ν от 0 до ∞ просто убирает δ -символ. В итоге имеем произведение двух рядов, из которых второй (несвязные диаграммы), после тривиального переобозначения переменных интегрирования, принимает вид

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots dt_n (-i)^n \langle \Phi_0 | T W(t_1) \dots W(t_n) | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | T \exp \left[-i \int_{-\infty}^{\infty} dt W(t) \right] | \Phi_0 \rangle, \end{aligned}$$

т.е. знаменатель выражения для функции Грина. Этот вклад сокращается, что и завершает доказательство теоремы.

Правила Фейнмана

Ясно, что в каждом связном члене m -того порядка будет точно $m!$ одинаковых вкладов из-за перегруппировки $t_1 \cdots t_m$ в $\langle \Phi_0 | T W(t_1) \dots W(t_m) \Psi_X \Psi_X^\dagger | \Phi_0 \rangle_{\text{св}}$. Это приведет к сокращению множителей $\frac{1}{m!}$, если учитывать только топологически различные диаграммы. Например: рис. 2.4. Эти две диаграммы второго порядка топологически эквивалентны, потому что они отличаются только индексами линий взаимодействия $12 \longleftrightarrow 34$. Возвращаясь к конкретному виду взаимодействия - скалярное электрон-электронное взаимодействие, отметим, что в этом случае есть еще множитель 2^{-n} , связанный с диаграммой вследствие множителя $1/2$ в записи этого взаимодействия. Этот множитель также сокращается, на этот раз из-за того, что не нужно различать концы линии взаимодействия: $1 \bullet - - \bullet 2$ и $2 \bullet - - \bullet 1$ - одно и то же, потому что существенны только индексы внешних концов, по внутренним проводится интегрирование. Приходим, в итоге, к *правилам Фейнмана* в этом случае:

1. Нарисовать все топологически неэквивалентные связные диаграммы Фейнмана.
2. Каждому элементу диаграммы сопоставить аналитическое выражение согласно таблице.

3. Умножить каждую диаграмму на $(-1)^F$, где F - число замкнутых петель с более чем одной вершиной (узлом), состоящих из фермионных линий. "Пузыри" (n^0) здесь не учитываются.

Происхождение правила 3 самоочевидно. Когда образуется фермионная петля, необходимо сворачивать (спаривать) фермионные операторы следующим образом:

$$\overbrace{\Psi_1 \Psi_2^\dagger} \overbrace{\Psi_2 \Psi_3^\dagger} \dots \overbrace{\Psi_N \Psi_1^\dagger}.$$

Так как в любом гамильтониане расположение этих операторов таково: $\Psi_1^\dagger \Psi_1$ и т.д., то это означает, что оператор Ψ_1^\dagger должен быть перемещен в крайнее правое положение через все оставшиеся операторы, т.е. через нечетное число операторов Ферми - через сопряженный ему оператор Ψ_1 и неважно через сколько пар $\Psi^\dagger \Psi$. Это дает общий знак $(-)$ и объясняет это правило. Пузыри не учитываются, так как пузырь соответствует паре $\Psi^\dagger \Psi$, и перестановка не нужна.

Если теперь совершить фурье-преобразование к импульсному представлению, то можно увидеть, что будут применяться те же правила, но таблица сопоставления элементам диаграмм аналитических выражений будет несколько другой. Будем обозначать через P набор \mathbf{p}, ω (рис. 2.5). Закон сохранения энергии и импульса в каждой

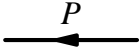
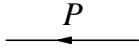


	$iG(P) = iG_{\alpha\alpha'}(\mathbf{p}, \omega)$	Причинная функция Грина
	$iG^0(P) = iG^0(\mathbf{p}, \omega) \delta_{\alpha\alpha'}$	Невозмущенная причинная функция Грина
	$-iU(Q) = -iU(\mathbf{q})$	Фурье-образ потенциала взаимодействия
	$n^0(\mu)$	Невозмущенная электронная плотность

Рис. 2.5: Правила Фейнмана для скалярного электрон-электронного взаимодействия (импульсное представление). Предполагается интегрирование по всем промежуточным импульсам и частотам ($dP/(2\pi)^4$) и суммирование по скрытым спиновым индексам, принимая во внимание сохранение энергии (частоты) и импульса в каждой вершине (узле)

вершине (который понижает число интегрирований в каждой вершине на единицу) имеет простое происхождение. В координатном представлении промежуточное интегрирование в вершине $Y = (\mathbf{y}, t_y)$ включает выражение

$$\int d^4Y G^0(\dots - Y) G^0(Y - \dots) U(Y - \dots).$$

Здесь принято во внимание, что невозмущенная функция Грина и потенциал взаимодействия являются пространственно однородными. Перепишем это выражение в фурье-компонентах:

$$\int \frac{d^4 K}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 K_1}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4 K_2}{(2\pi)^4} \int d^4 Y \exp \{i [K(\cdots - Y) + K_1(Y - \cdots) + K_2(Y - \cdots)]\} \\ \times G^0(K) G^0(K_1) U(K_2).$$

Интеграл по Y может быть взят немедленно:

$$\begin{aligned} & \int d^4 Y \exp \{iY [-K + K_1 - K_2]\} \\ &= \int dt_y \exp \{-it_y [-\omega + \omega_1 - \omega_2]\} \int d^3 y \exp \{iy [-\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2]\} \\ &= (2\pi)^4 \delta(-\omega + \omega_1 - \omega_2) \delta(-\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2). \end{aligned}$$

Таким образом, энергия (частота) и импульс (волновой вектор) сохраняются в каждой вершине. Физическая причина для этого ясна: каждая вершина диаграммы описывает процесс рассеяния. Гамильтониан рассматриваемой задачи, который описывает такое рассеяние, пространственно однороден и не зависит от времени, что находится в согласии с общими принципами, приводящими к сохранению импульса и энергии.

Кроме скалярного электрон-электронного взаимодействия, другим важным взаимодействием в твердотельных системах является электрон-фононное взаимодействие. Это взаимодействие описывается в гамильтониане членами, пропорциональными

$$H_{e-ph} \sim \Psi_X^\dagger \Psi_X \varphi_X.$$

Это выражение эрмитово, так как фононный оператор φ , как определялось ранее, является действительным. Тогда ясно, что только члены четного порядка по электрон-фононному взаимодействию входят в разложение по возмущению, потому что в противном случае будут неспаренные фононные операторы, дающие нулевое вакуумное среднее. В членах четного порядка фононные операторы спариваются, образуя невозмущенные фононные функции Грина (пропагаторы) $D^0(\mathbf{k}, \omega)$. Определение вершины и фононного пропагатора зависит от соглашения. Дадим здесь, для удобства, правила, использованные в двух основных монографиях по методам квантовой теории поля в физике конденсированного состояния (авторы: Абрикосов, Горьков, Дзялошинский - АГД [1], и Мейхан (Mahan) [5]) (рис. 2.6). Последующее обсуждение не зависит от таких деталей, но каждый раз, когда проводятся конкретные вычисления (или используются конкретные вычисления), необходимо проверять все соглашения заранее.

2.5 Операции с диаграммами. Собственно-энергетическая функция. Уравнение Дайсона

Одна из причин того, почему функции Грина так широко используются, заключается в том, что соответствующие диаграммы имеют очень удобное свойство: *значение любой фейнмановской диаграммы для функции Грина может быть найдено как*

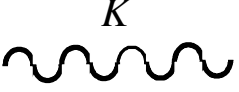
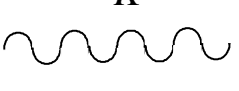
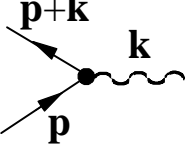
	$iD(K)=iD(\mathbf{k}, \omega)$	Точный фононный пропагатор
	$iD^0(K)=iD^0(\mathbf{k}, \omega)=$ $i\omega_k^2/(\omega^2-\omega_k^2+i0)$ (АГД) $i2\omega_k/(\omega^2-\omega_k^2+i0)$ (М)	Невозмущенный фононный пропагатор
	$-ig$ (АГД) $-i M_k $ (М)	Постоянная электрон-фононной связи Электрон-фононный матричный элемент

Рис. 2.6: Правила Фейнмана для электрон-фононного взаимодействия (импульсное представление)

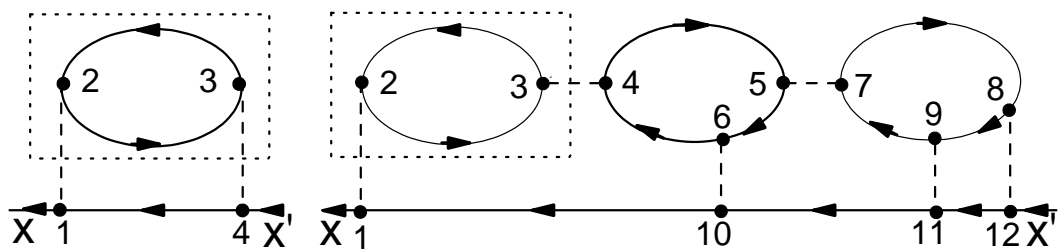


Рис. 2.7: Две различные диаграммы, содержащие один и тот же блок

композиция выражений, соответствующих её частям, независимо от структуры диаграммы как целого. Другими словами, каждая "фигура" на диаграмме имеет определенный аналитический смысл независимо от того, в какую диаграмму она входит, так что можно её вычислять независимо и заранее. Мало того, можно заранее вычислить сумму некоторых фигур, имеющих определенное число концов, и затем вставить этот "блок" в более сложные диаграммы. Отметим, что это не так, например, в случае диаграммного разложения для большого термодинамического потенциала. Второе замечание: одним из таких "блоков", имеющих существенное самостоятельное значение, является так называемая собственно-энергетическая функция. Рассмотрим две различные диаграммы, изображенные на следующем рисунке (рис. 2.7). Это диаграммы второго и шестого порядка соответственно. Выпишем аналитические выражения для них и подчеркнем члены, соответствующие

выделенным частям диаграмм:

$$\begin{aligned} & \int d1d2d3d4 \left[iG^0(X, 1)iG^0(1, 4)iG^0(4, X') \underbrace{(-1)iG^0(2, 3)iG^0(3, 2)}_{(-1)U(2, 3)} (-iU(1, 2)) (-iU(3, 4)) \right]; \\ & \int d1d2d3d4d5d6d7d8d9d10d11d12 \\ & \times \left[iG^0(X, 1)iG^0(1, 10)iG^0(10, 11)iG^0(11, 12)iG^0(12, X') \underbrace{(-1)iG^0(2, 3)iG^0(3, 2)}_{(-1)U(2, 3)} \right. \\ & \times (-1)iG^0(4, 6)iG^0(6, 5)iG^0(5, 4)(-1)iG^0(7, 9)iG^0(9, 8)iG^0(8, 7) (-iU(1, 2)) (-iU(3, 4)) \\ & \left. \times (-iU(5, 7)) (-iU(9, 11)) (-iU(8, 12)) (-iU(6, 10)) \right]. \end{aligned}$$

Конечное выражение просто конструируется из элементарных блоков как

$$\begin{array}{c} \bullet 2 \quad \bullet 3 \\ \curvearrowright \\ \bullet 3 \quad \bullet 2 \end{array} = (-1)iG^0(2, 3)iG^0(3, 2).$$

Это сильно отличается от диаграммного ряда для большого термодинамического потенциала Ω , в котором множитель $1/n$ в каждой диаграмме n -того порядка запрещает такое частичное суммирование.

Идея такого суммирования проста, но математически слаба. Предположим, что есть диаграмма, например (рис. 2.8). В бесконечном ряду для гриновской функции



Рис. 2.8: Диаграмма

есть бесконечное подмножество диаграмм вида (рис. 2.9), которые включают всевоз-



Рис. 2.9: Подмножество диаграмм

можные поправки к внутренней линии. Вследствие того, что нет явной зависимости выражения от порядка диаграммы, можно забыть обо всем, что лежит за этими точками взаимодействия, и сконцентрировать внимание на внутренней части диаграмм. Эти поправки должны трансформировать тонкую линию (невозмущенная

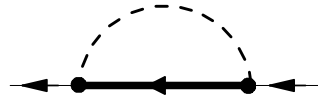


Рис. 2.10: Точная функция Грина

функция Грина G^0) в толстую линию (точная функция Грина G) в таком же виде, как весь ряд дает точную функцию Грина G (рис. 2.10). Таким образом, выполнено частичное суммирование диаграммного ряда для функции Грина. Это, однако, еще не победа. Во-первых, суммирование такого сорта все еще дает уравнение - самосогласованное уравнение для точной функции Грина, обычно нелинейное интегральное или интегро-дифференциальное. Решить его в действительности трудно. Во-вторых, нет никакой гарантии, что это уравнение правильное. Действительно, известно, что только для очень ограниченного класса сходящихся рядов (абсолютно сходящихся) сумма не зависит от порядка членов. А здесь было произведено перераспределение членов ряда по возмущению, о которых неизвестно (и, обычно, не может быть известно), сходятся ли они вообще. Оправданием этому служат получающиеся результаты: если они неправильны, то тогда что-то неправильно в соответствующем выборе частичного суммирования (очевидно, что вариантов частичного суммирования много, каждый является приближенным, так как некоторыми классами диаграмм пренебрегается). Или, может быть, что-то странное наблюдается в системе, но это уже полезная информация. С этой ситуацией встречаемся при применении этой теории к сверхпроводимости (необходимо учитывать перестройку энергетического спектра). В большинстве случаев результаты являются правильными, если такое частичное суммирование сделано с учетом физики задачи. Обычно можно увидеть, с физической строгостью, если нет математической строгости, что определенный класс диаграмм более важен, чем другие, и поэтому результат его суммирования отражает существенные свойства системы.

Для систематического рассмотрения таких частичных суммирований введем ряд определений. *Собственно-энергетической частью* называется любая часть диаграммы, связанная с оставшейся частью только двумя линиями частиц. *Неприводимая собственно-энергетическая часть* есть собственно-энергетическая часть, которая не может быть разделена на собственно-энергетические части путем удаления одночастичной линии. Наконец, *собственно-энергетическая функция* или *массовый оператор* есть сумма всех возможных неприводимых собственно-энергетических частей и обозначается как $\Sigma(X, X')$. Это название дано по историческим причинам (из квантовой теории поля), и его смысл станет яснее несколько позже. Изобразим эти части (рис. 2.11). Удобно включить множитель $(-i)$ в определение \bullet . Тогда ряд для функции Грина может быть прочитан и нарисован (рис. 2.12) следующим образом:

$$iG = iG^0 + iG^0 \Sigma G^0 + iG^0 \Sigma G^0 \Sigma G^0 + \dots$$

Выделяя множитель iG^0 , получаем знаменитое уравнение Дайсона:

$$G(X, X') = G^0(X, X') + \int dX'' \int dX''' G^0(X, X'') \Sigma(X'', X''') G(X''', X').$$

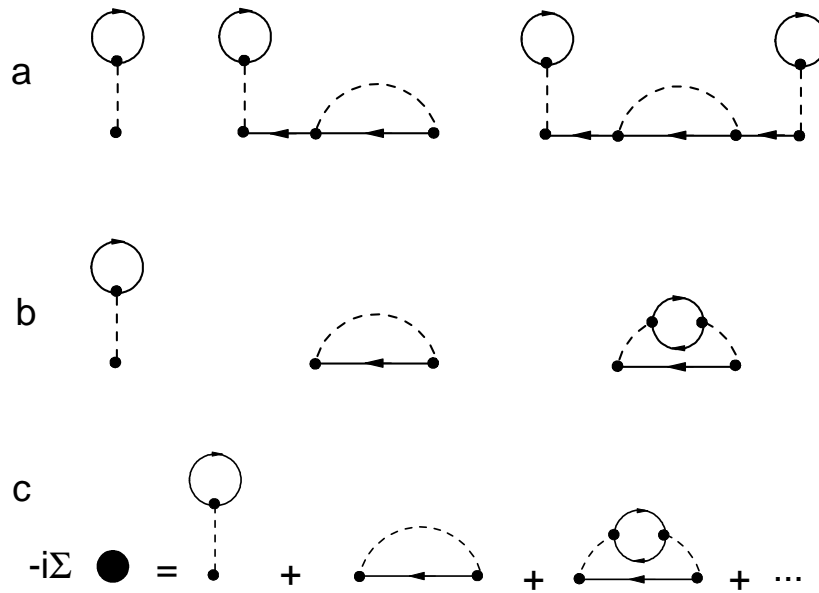


Рис. 2.11: Собственно-энергетические диаграммы: **a** собственно-энергетические части, **b** неприводимые собственно-энергетические части, **c** собственно-энергетическая функция

$$\begin{aligned}
 \text{---} \leftarrow &= \text{---} \leftarrow + \text{---} \leftarrow \bullet \leftarrow + \text{---} \leftarrow \bullet \leftarrow \bullet \leftarrow + \dots = \\
 &= \text{---} \leftarrow + \text{---} \leftarrow \bullet \leftarrow (\text{---} \leftarrow + \text{---} \leftarrow \bullet \leftarrow + \text{---} \leftarrow \bullet \leftarrow \bullet \leftarrow + \dots) = \\
 &= \text{---} \leftarrow + \text{---} \leftarrow \bullet \leftarrow \text{---} \leftarrow
 \end{aligned}$$

Рис. 2.12: Уравнение Дайсона

Конечно, можно взять G^0 с другой стороны и получить

$$G(X, X') = G^0(X, X') + \int dX'' \int dX''' G(X, X'') \Sigma(X'', X''') G^0(X''', X').$$

В импульсном представлении это выглядит так:

$$G(P) = G^0(P) + G^0(P) \Sigma(P) G(P).$$

Откуда

$$G(\mathbf{p}, \omega) = \left\{ [G^0(\mathbf{p}, \omega)]^{-1} - \Sigma(\mathbf{p}, \omega) \right\}^{-1} = \frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{p}) + \mu - \Sigma(\mathbf{p}, \omega)}. \quad (2.17)$$

Символически это может быть записано так:

$$\hat{G} = \left[i \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{E} - \hat{\Sigma} \right]^{-1}.$$

Это уравнение имеет место, даже если G и Σ не диагональны (т.е. в неоднородном случае), понимая $\left[i \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{E} - \hat{\Sigma} \right]^{-1}$ как обратный оператор.

Важное свойство (2.17) заключается в том, что если подставить в него некоторое приближение для собственно-энергетической функции конечного порядка, то результирующее приближение для $G(\mathbf{p}, \omega)$ будет эквивалентно вычислению бесконечных подрядов ряда для возмущения, а это дает намного лучший результат, чем простое вычисление начального ряда член за членом. Это естественное следствие самосогласованного подхода. Другое, менее приятное следствие состоит в том, что любая приближенная собственно-энергетическая функция должна быть проверена на то, согласуется ли она с общими аналитическими свойствами функции Грина (которые следуют из общего принципа причинности). Возвращаясь к (2.17) и вспоминая представление Челлена-Лемана, получим, что необходимо выполнение условий:

$$\begin{aligned} \text{Im } \Sigma(\mathbf{p}, \omega) &\geq 0, \quad \omega < 0, \\ \text{Im } \Sigma(\mathbf{p}, \omega) &\leq 0, \quad \omega > 0. \end{aligned}$$

$\text{Im } \Sigma$ есть обратное время жизни элементарного возбуждения, в то время как $\text{Re } \Sigma$ определяет изменение закона дисперсии вследствие взаимодействия. В квантовой теории поля это ведет и изменению массы частицы, вот почему Σ также называют массовым оператором.

2.6 Перенормировка взаимодействия. Поляризационный оператор

Следуя тому же подходу, можно рассмотреть вставки в линию взаимодействия такого вида (рис. 2.13).

Поляризационной вставкой называется часть диаграммы, которая связана с оставшейся частью только двумя линиями взаимодействия. *Неприводимая поляризационная вставка* есть поляризационная вставка, которая не может быть разделена на

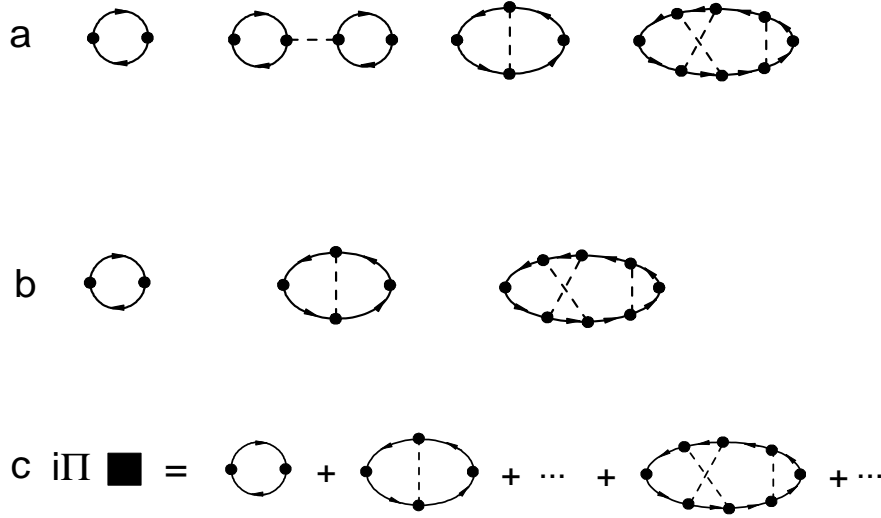


Рис. 2.13: Перенормировка взаимодействия: **a** поляризационные вставки, **b** неприводимые поляризационные вставки, **c** поляризационный оператор

поляризационные вставки путем удаления одной линии взаимодействия. Наконец, *поляризационный оператор* есть сумма всех неприводимых поляризационных вставок и есть прямая аналогия собственно-энергетической функции. Так как в определении линии взаимодействия есть множитель $(-i)$, то удобно ввести множитель (i) в поляризационный оператор. Для поляризационного оператора можно получить уравнение, аналогичное уравнению Дайсона (рис. 2.14):

$$U_{eff}(P) = U(P) + U(P)\Pi(P)U_{eff}(P).$$

Тогда обобщенная диэлектрическая функция $\varepsilon(\mathbf{p}, \omega)$, которая описывает воздействие поляризации среды на взаимодействие частица-частица:

$$U_{eff}(\mathbf{p}, \omega) = \frac{U(\mathbf{p}, \omega)}{\varepsilon(\mathbf{p}, \omega)} = \frac{U(\mathbf{p}, \omega)}{1 - U(\mathbf{p}, \omega)\Pi(\mathbf{p}, \omega)}.$$

Хорошим примером такого воздействия является экранирование кулоновского взаимодействия.

2.6.1 Экранирование кулоновского взаимодействия

Результат Томаса-Ферми, касающийся экранирования кулоновского потенциала заряженным ферми-газом, может быть воспроизведен, если использовать приближение случайных фаз (ПСФ), которое здесь означает оставление члена нижайшего

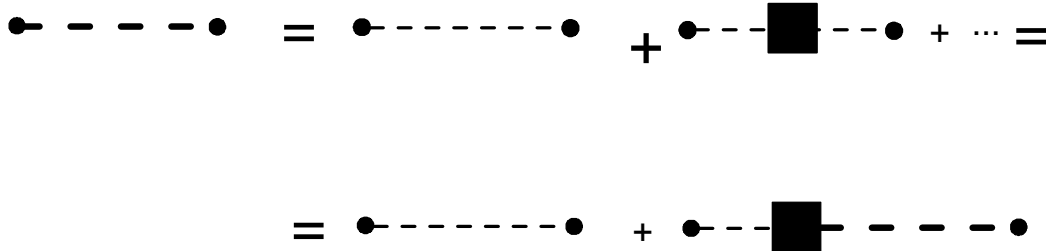


Рис. 2.14: Уравнение для поляризационного оператора

порядка в поляризационном операторе:

$$i\Pi_0(\mathbf{p}, \omega) = \begin{array}{c} \text{p}+\mathbf{q}, \omega+\xi \\ \circ \quad \circ \\ \text{q}, \xi \end{array} = 2 \int \frac{d^3 q d\xi}{(2\pi)^4} G^0(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega + \xi) G^0(\mathbf{q}, \xi).$$

Вычисления дают следующий результат для статического экранирования:

$$\begin{aligned} \text{Re } \Pi_0(\mathbf{p}, 0) &= -\frac{mp_F}{2\pi^2} \left[1 + \frac{p_F^2 - \frac{p^2}{4}}{p_F p} \ln \left| \frac{p_F + \frac{p}{2}}{p_F - \frac{p}{2}} \right| \right], \\ \text{Im } \Pi_0(\mathbf{p}, 0) &= 0. \end{aligned}$$

Для дальнего действующего экранирования ($p \ll p_F$)

$$\Pi_0 \approx -2N(\mu),$$

где $N(\mu) \equiv \frac{mp_F}{2\pi^2}$ - плотность состояний на поверхности Ферми. Таким образом, фурье-преобразование взаимодействия есть ($U(\mathbf{q}) = 4\pi e^2/q^2$)

$$U_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2/q^2}{1 + 2N(\mu)4\pi e^2/q^2} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + 8\pi e^2 N(\mu)}.$$

Величина

$$q_{\text{TF}}^2 = 8\pi e^2 N(\mu)$$

есть квадрат волнового вектора Томаса-Ферми, а потенциал действительно имеет вид потенциала Юкавы

$$U_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{r} \exp(-q_{\text{TF}} r).$$

Таким образом, присутствие других заряженных частиц приводит к экранированию первоначально дальнего действующего кулоновского взаимодействия и ограничивает его к конечному радиусу Томаса-Ферми. Как это происходит, графически ясно из простейшей поляризационной диаграммы. Взаимодействие создает виртуальную

электрон-дырочную пару (именно виртуальную, потому что соотношение энергия-импульс для каждой внутренней линии диаграммы нарушается: интегрирование по всем энергиям и всем импульсам проводится независимо; для реальной частицы выполняется соотношение типа $E = p^2/2m$). В используемом приближении включены только независимые события создания электрон-дырочной пары: поскольку энергия и импульс вдоль линии взаимодействия сохраняются, то квантовомеханическая фаза электрон-дырочной пары немедленно теряется и не влияет на следующую виртуальную пару. В этом причина названия этого приближения - приближение случайных фаз (рис. 2.15a). Это приближение, как обычно, хорошо работает, если в пределах

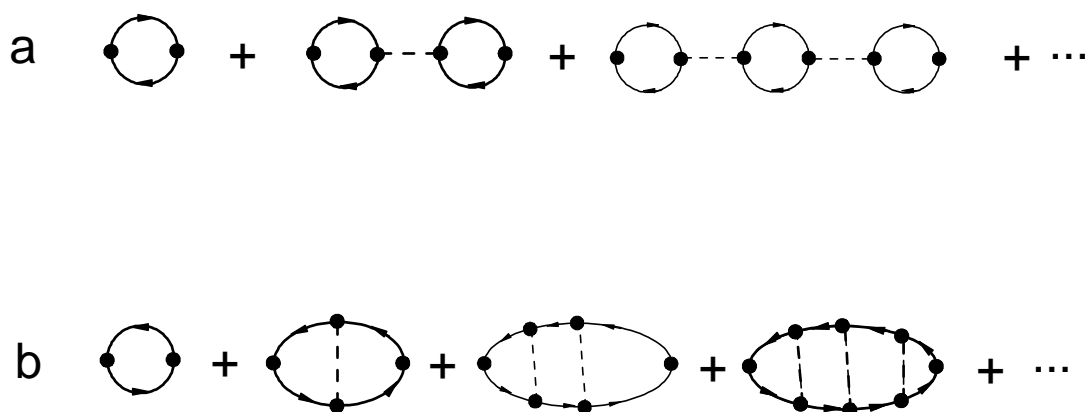


Рис. 2.15: Приближение случайных фаз (a) и лестничное приближение (b)

радиуса взаимодействия находится большое число частиц (ферми-газ большой плотности), тогда, действительно, более вероятно провзаимодействовать с двумя различными частицами последовательно, чем с одной и той же дважды.

В противоположном случае, когда плотность числа частиц низка, ПСФ становится, естественно, несправедливым, в то время как становится подходящим *лестничное приближение* (рис. 2.15b). В этом случае, виртуальная пара (квазичастица-квазидырка) взаимодействует многократно перед исчезновением. Это вновь разумно, поскольку, когда плотность низка, маловероятно найти легко другую квазичастицу, чтобы провзаимодействовать с ней.

Физический смысл эффективного взаимодействия: "голый" потенциал виртуально поляризует среду, и поляризационное облако экранирует этот потенциал, превращая его в значительно более слабое эффективное взаимодействие (это есть просто взаимодействие между частицами).

Если теперь в приближении случайных фаз искать собственно-энергетическую функцию, то можно убедиться, что она приводит к изменению дисперсионного соотношения и к конечному времени жизни квазичастицы - переходим к квазиэлектрону, который состоит из "голового" электрона и положительного экранирующего облака. Это можно представить и иначе в терминах электронов и дырок: электрон своим кулоновским потенциалом расталкивает другие электроны из прилегающей к нему

области; тогда можно сказать, что этот электрон окружен "дырочным облаком" или, как обычно говорят, электрон сопровождается "корреляционной дыркой".

Используя эффективный потенциал, можно чрезвычайно сильно упростить разложение для собственно-энергетической функции (рис. 2.16). Следует подчеркнуть,

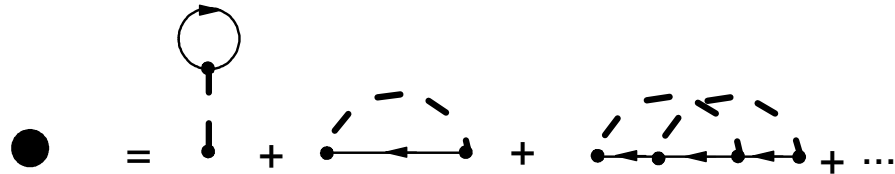


Рис. 2.16: Разложение собственно-энергетической функции с использованием эффективного потенциала

что при построении таких диаграмм нельзя включать поляризационные вставки, поскольку они все учтены заменой линии взаимодействия на линию эффективного взаимодействия. Например, диаграмма (рис. 2.17) совершенно незаконна, так как

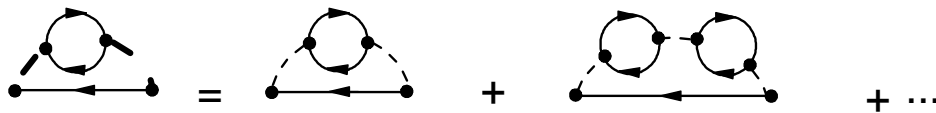


Рис. 2.17: Диаграмма

она включена в диаграммы (рис. 2.18). Таким образом, мы приходим к значительно

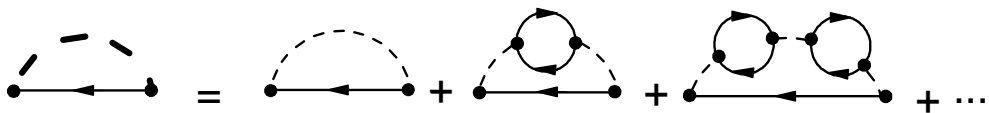


Рис. 2.18: Диаграммы

более простому ряду (рис. 2.16), в котором нет ни одной линии взаимодействия, явно содержащей поляризационные вставки, и все линии взаимодействия "одетые".

2.7 Самосогласованная теория возмущений

Рассмотрим следующую последовательность действий:

- 1) сначала вычисляем собственнo-энергетическую функцию с голыми линиями;
- 2) подставляем в уравнение Дайсона в виде

$$G(P) = \left\{ [G^0(P)]^{-1} - \Sigma(P) \right\}^{-1},$$

получаем одетую функцию Грина в первом приближении;

3) затем находим собственнo-энергетическую функцию с функцией Грина в первом приближении;

4) находим функцию Грина во втором приближении и т.д. до тех пор, пока все не перестанет изменяться, т.е. результат не станет самосогласованным.

Такая процедура носит название самосогласованной теории возмущений, другими словами, приближения Хартри-Фока.

Можно перенормировать одновременно как функцию Грина, так и потенциал взаимодействия, так что для собственнo-энергетической функции получается следующий ряд (рис. 2.19). В литературе одетые линии часто заменяются тонкими, подра-

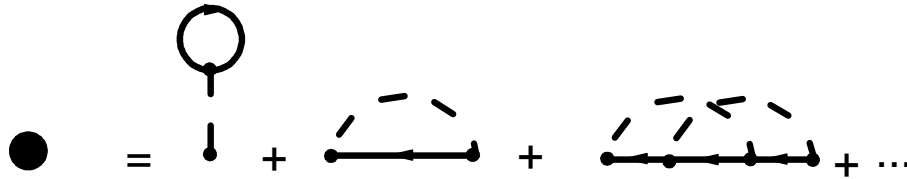


Рис. 2.19: Собственнo-энергетическая функция в приближении Хартри-Фока с динамическим взаимодействием

зумекая, что все линии одетые. Данное приближение носит название приближение Хартри-Фока с динамическим взаимодействием.

2.8 Многочастичные функции Грина. Вершинная функция

Функции Грина, как ясно из ранее изложенного, дают удобный аппарат для описания систем многих частиц. До сих пор использовалась одночастичная гриновская функция, связанная с единственным квазичастичным возбуждением при многочастичном фоне. Эти одночастичные функции Грина не могут быть применены, следовательно, к случаю связанного состояния двух таких возбуждений. Действительно, в ферми-системе такое состояние будет бозоном, в то время как одночастичная функция Грина описывает фермион.

Эта проблема может быть легко решена. Ничто не ограничивает нас рассмотрением только средних $\langle \Psi \Psi^\dagger \rangle$. "Уравнение Шредингера" для $G(X, X')$ включает члены $\langle \Psi \Psi \Psi^\dagger \Psi^\dagger \rangle$. Поэтому естественно ввести n -частичные функции Грина (как обычно, здесь нет общего соглашения, поэтому при чтении статей нужно выяснить, какое определение в действительности используется).

n -частичная (или $2n$ -точечная) функция Грина определяется как

$$\begin{aligned} & G_{(n)\alpha_1 \dots \alpha_n \alpha'_1 \dots \alpha'_n}(\mathbf{x}_1 t_1, \dots, \mathbf{x}_n t_n; \mathbf{x}'_1 t'_1, \dots, \mathbf{x}'_n t'_n) \\ & \equiv G_{(n)}(12 \dots n; 1'2' \dots n') \\ & = \frac{1}{i^n} \left\langle T \Psi_1 \Psi_2 \dots \Psi_n \Psi_{n'}^\dagger \dots \Psi_{2'}^\dagger \Psi_{1'}^\dagger \right\rangle. \end{aligned}$$

Правила рисования и чтения фейнмановских диаграмм остаются такими же и могут быть легко получены из разложения S -оператора в среднем $\langle T \Psi_1 \Psi_2 \dots \Psi_{2'}^\dagger \Psi_{1'}^\dagger \rangle$. Есть только одно дополнительное правило. Для пояснения этого правила используем удобное графическое представление многочастичной функции Грина (рис. 2.20), которое носит название "растянутая кожа" (stretched skin) (см., например, [7]). Эта

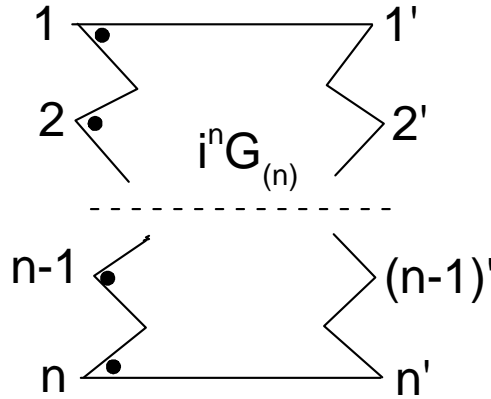


Рис. 2.20: Многочастичная функция Грина в графическом представлении "растянутая кожа" (точки символизируют выходящие концы)

диаграмма умножается на $(-1)^P$, где P - число парных перестановок концов фермионных линий $(12 \dots n) \longleftrightarrow (1'2' \dots n')$ (см. рис. 2.21).

Происхождение этого правила легко увидеть после применения теоремы Вика к выражению нижайшего порядка для двухчастичной функции Грина:

$$\begin{aligned} & G_{(2)}(12, 1'2') \\ & \equiv (-i)^2 \left\langle T \Psi_1 \Psi_2 \Psi_{2'}^\dagger \Psi_{1'}^\dagger \right\rangle \\ & \approx (-i) \left\langle T \Psi_1 \Psi_{1'}^\dagger \right\rangle_0 (-i) \left\langle T \Psi_2 \Psi_{2'}^\dagger \right\rangle_0 \\ & \quad \mp (-i) \left\langle T \Psi_1 \Psi_{2'}^\dagger \right\rangle_0 (-i) \left\langle T \Psi_2 \Psi_{1'}^\dagger \right\rangle_0 \\ & = G^0(11') G^0(22') \mp G^0(12') G^0(21'). \end{aligned} \tag{2.18}$$

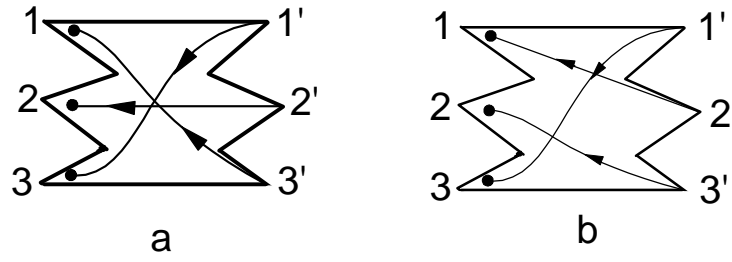


Рис. 2.21: Правило знака для многочастичной функции Грина: **a** $(1, 2, 3) \leftrightarrow (3', 2', 1')$, одна парная перестановка, знак -1 ; **b** $(1, 2, 3) \leftrightarrow (2', 3', 1')$, две парных перестановки, знак $+1$

Теорема сокращения "удаляет" только диаграммы со свободными частями, отсоединенными от внешних концов. Это означает, что не каждая диаграмма, выглядящая как несвязная, является на самом деле несвязной. Например, диаграммы, соответствующие (2.18), не являются несвязными и не сокращаются (рис. 2.22, первые две диаграммы в правой части). Фактически они соответствуют *приближению Хартри-Фока* для двухчастичной функции Грина (прямой и обменный члены, как очевидно из их структуры).

Наиболее широко используется двухчастичная функция Грина, поэтому для нее есть специальная буква K :

$$K(12, 1'2') = - \left\langle T \Psi_1 \Psi_2 \Psi_2^\dagger \Psi_1^\dagger \right\rangle.$$

Её диаграммное разложение до второго порядка имеет вид (рис. 2.22).

Важность двухчастичной функции Грина состоит в том, что:

- 1) она определяет амплитуду рассеяния квазичастиц, т.е. их взаимодействия;
- 2) её полюсы определяют закон дисперсии двухчастичных возбуждений (т.е. бозонных возбуждений в нормальной ферми-системе - скажем, нулевого звука), так же как и появление основного состояния двух квазичастиц (и, поэтому, точку перехода в сверхпроводящее состояние).

Можно определить неприводимую двухчастичную функцию Грина выделением всех кажущихся несвязными диаграмм (рис. 2.23). Эта совокупность всех кажущихся несвязными диаграмм представляет собой *самосогласованное приближение Хартри-Фока* для двухчастичной функции Грина (самосогласованное потому, что содержит точные одночастичные функции Грина):

$$G(11')G(22') \mp G(12')G(21') = G^0(11')G^0(22') \mp G^0(12')G^0(21') + \dots$$

Оставшаяся часть есть *неприводимая двухчастичная функция Грина*, которая выражается через *вершинную функцию* Γ :

$$\begin{aligned} & \tilde{K}(12, 1'2') \\ &= K(12, 1'2') - [G(11')G(22') \mp G(12')G(21')] \\ &= \int d3d3'd4d4' G(13)G(24)i\Gamma(34, 3'4')G(3'1')G(4'2'). \end{aligned} \quad (2.19)$$

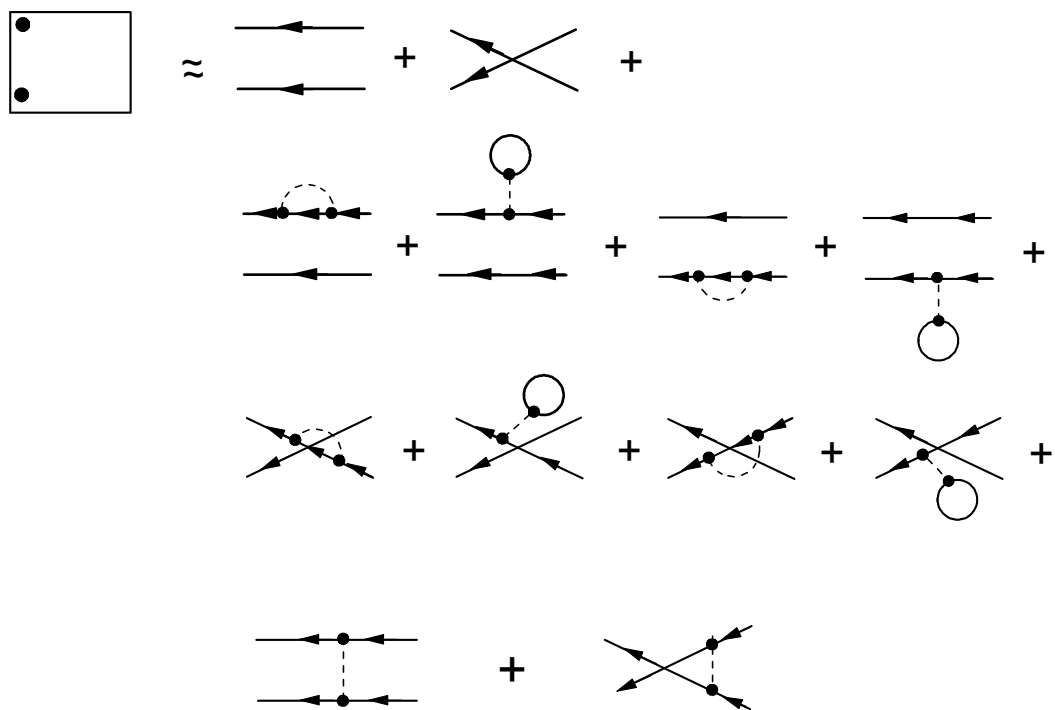


Рис. 2.22: Диаграммное разложение двухчастичной функции Грина до второго порядка

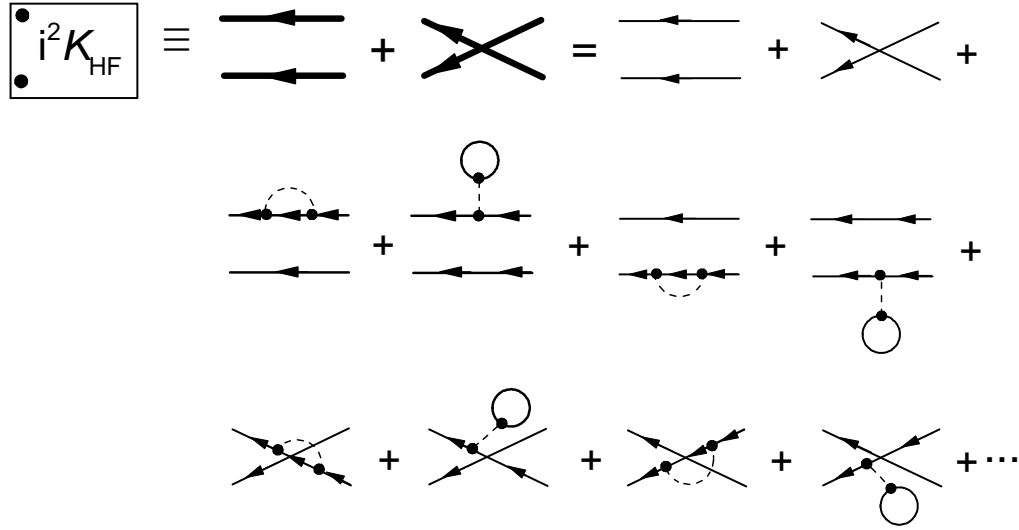


Рис. 2.23: Обобщенное приближение Хартри-Фока для двухчастичной функции Грина

Графическое представление \tilde{K} (12, 1'2') имеет вид (рис. 2.24).

$$\begin{array}{c} 1 \\ \bullet \\ \boxed{i^2 \tilde{K}} \\ \bullet \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} 1' \\ \\ 2' \end{array} \equiv \begin{array}{c} \bullet \\ \boxed{i^2 K} \\ \bullet \end{array} - \begin{array}{c} \bullet \\ \boxed{i^2 K_{\text{HF}}} \\ \bullet \end{array} = \begin{array}{c} 1 \quad 3 \quad 3' \quad 1' \\ \leftarrow \quad \leftarrow \quad \leftarrow \quad \leftarrow \\ \text{---} \boxed{-i\Gamma} \text{---} \\ \leftarrow \quad \leftarrow \quad \leftarrow \quad \leftarrow \\ 2 \quad 4 \quad 4' \quad 2' \end{array}$$

Рис. 2.24: Неприводимая часть двухчастичной функции Грина и вершинная функция

Как уже отмечалось, полюсы двухчастичной функции Грина определяют двухчастичные возбуждения системы так же, как полюсы одночастичной функции Грина определяют квазичастицы. Примерами таких возбуждений в ферми-системах являются нулевой звук и плазмоны (плазменные колебания). Очевидно, что значимые полюсы двухчастичной функции Грина появляются только в вершинной функции: "концы" есть одночастичные функции Грина и, как таковые, не вносят чего-либо нового. Поэтому сосредоточим внимание на вершинной функции.

Рассуждения проще вести в импульсном представлении, если, как обычно, иметь дело со стационарной, пространственно однородной системой. Очевидно, что толь-

ко три набора переменных из четырех независимы, потому что равномерный сдвиг координат или времени не должен менять что-либо. Выберем следующий набор независимых комбинаций:

$$X_1 - X_{2'}, X_2 - X_{2'}, X_{1'} - X_{2'}.$$

Здесь и далее $X = \mathbf{x}, t$; $P = \mathbf{p}, \omega$ и "скалярное произведение" $PX = \mathbf{p}\mathbf{x} - \omega t$. Тогда двухчастичная функция Грина в импульсном пространстве определяется как

$$\begin{aligned} & \int dX_1 dX_{1'} dX_2 dX_{2'} \exp[-i(P_1 X_1 + P_2 X_2 - P_{1'} X_{1'} - P_{2'} X_{2'})] K(X_1, X_2; X_{1'}, X_{2'}) \\ &= (2\pi)^4 \delta(P_1 + P_2 - P_{1'} - P_{2'}) K(P_1, P_2; P_{1'}, P_1 + P_2 - P_{1'}). \end{aligned}$$

Фурье-преобразование для любой функции этих четырех наборов переменных определяется выражением:

$$\begin{aligned} & K(P_1, P_2; P_{1'}, P_1 + P_2 - P_{1'}) \\ &= \int d(X_1 - X_{2'}) d(X_2 - X_{2'}) d(X_{1'} - X_{2'}) \\ & \quad \times \exp[-i(P_1(X_1 - X_{2'}) + P_2(X_2 - X_{2'}) - P_{1'}(X_{1'} - X_{2'}))] \\ & \quad \times K(X_1, X_2; X_{1'}, X_{2'}), \\ & K(X_1, X_2; X_{1'}, X_{2'}) \\ &= \int \frac{dP_1}{(2\pi)^4} \frac{dP_2}{(2\pi)^4} \frac{dP_{1'}}{(2\pi)^4} \exp[i(P_1(X_1 - X_{2'}) + P_2(X_2 - X_{2'}) - P_{1'}(X_{1'} - X_{2'}))] \\ & \quad \times K(P_1, P_2; P_{1'}, P_1 + P_2 - P_{1'}). \end{aligned}$$

Уравнение (2.19) может быть переписано так:

$$\begin{aligned} & \tilde{K}(P_1, P_2; P_{1'}, P_1 + P_2 - P_{1'}) \\ &= G(P_1)G(P_2)i\Gamma(P_1, P_2; P_{1'}, P_1 + P_2 - P_{1'})G(P_{1'})G(P_1 + P_2 - P_{1'}). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Сейчас можно получить для скалярного электрон-электронного взаимодействия важное общее соотношение между вершинной функцией и собственно-энергетической функцией. Вполне разумно, что такое соотношение между Γ и Σ должно существовать, поскольку как Γ , так и Σ имеют общее то, что они есть результат суммирования всех каким-либо образом неприводимых диаграмм. Начнем с того, что выпишем уравнение движения для одночастичной функции Грина в координатном представлении. Это уравнение будет содержать, как мы уже видели, двухчастичную функцию Грина:

$$\begin{aligned} & \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m} \nabla_x^2 + \mu \right) G_{\alpha\alpha'}(X, X') \\ &= \delta_{\alpha\alpha'} \delta(X - X') - i \int d^4Y U(X - Y) K_{\alpha\gamma, \alpha'\gamma}(X, Y; X', Y). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Здесь было использовано определение

$$\begin{aligned} & \left\langle T \Psi_\gamma^\dagger(Y) \Psi_\gamma(Y) \Psi_\alpha(X) \Psi_{\alpha'}^\dagger(X') \right\rangle \\ &= K_{\alpha\gamma, \alpha'\gamma}(X, Y; X', Y) \\ &= - \left\langle T \Psi_\alpha(X) \Psi_\gamma(Y) \Psi_\gamma^\dagger(Y) \Psi_{\alpha'}^\dagger(X') \right\rangle. \end{aligned}$$

Вновь предполагаем, что система является однородной, стационарной и изотропной. Тогда в импульсном пространстве (2.19) выглядит как

$$\left[[G^0(P)]^{-1} G(P) - 1 \right] \delta_{\alpha\alpha'} = -i \int \frac{dP_1 dP_2}{(2\pi)^8} U(P - P_1) K_{\alpha\gamma, \alpha'\gamma}(P_1, P_2; P, P_1 + P_2 - P).$$

Здесь $[G^0(P)]^{-1} \equiv \omega - \frac{p^2}{2m} + \mu$ есть функция, а не оператор, и просто равна $1/G_0(P)$. Подставляем в это уравнение определение (2.20) и делим на $G(P)$. В итоге получаем

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{G^0(P)} - \frac{1}{G(P)} \right] \delta_{\alpha\alpha'} \\ &= -i \delta_{\alpha\alpha'} U(0) \int \frac{dP_2}{(2\pi)^4} G(P_2) + i \delta_{\alpha\alpha'} \int \frac{dP_1}{(2\pi)^4} U(P - P_1) G(P_1) \\ &+ \int \frac{dP_1 dP_2}{(2\pi)^8} U(P - P_1) \Gamma_{\alpha\gamma, \alpha'\gamma}(P_1, P_2; P, P_1 + P_2 - P) G(P_1) G(P_2) G(P_1 + P_2 - P). \end{aligned}$$

Согласно уравнению Дайсона, $\frac{1}{G^0(P)} - \frac{1}{G(P)} = \Sigma(P)$, а $-i \int \frac{dP_2}{(2\pi)^4} G(P_2) = n(\mu)$ - точная плотность системы как функция её химического потенциала. Тогда искомое уравнение имеет вид:

$$\begin{aligned} & \Sigma(P) \delta_{\alpha\alpha'} \\ &= U(0) n(\mu) \delta_{\alpha\alpha'} + i \delta_{\alpha\alpha'} \int \frac{dP_1}{(2\pi)^4} U(P - P_1) G(P_1) \\ &+ \int \frac{dP_1 dP_2}{(2\pi)^8} G(P_1) G(P_2) \Gamma_{\alpha\gamma, \alpha'\gamma}(P_1, P_2; P, P_1 + P_2 - P) G(P_1 + P_2 - P) U(P - P_1). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Графическое представление (2.22) имеет вид (рис. 2.25). Первые два члена в (2.22)

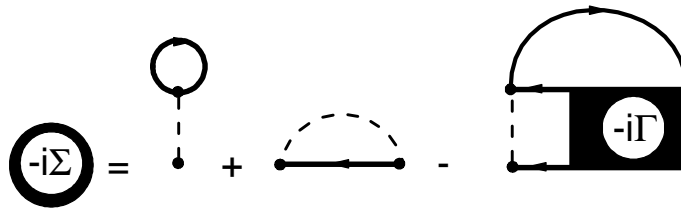


Рис. 2.25: Соотношение между собственно-энергетической функцией и вершинной функцией

дают самосогласованное приближение Хартри-Фока с начальным (голым) потенциалом: они учитывают взаимодействие пробной частицы со средой и с собой (обменный член). Остаток должен содержать эффекты перенормировки взаимодействия, и, действительно, третья диаграмма может быть понята как содержащая *перенормированную вершину взаимодействия* (рис. 2.26). Как видно, она содержит, в частности, все поляризационные вставки в линию взаимодействия. Это причина того, что на

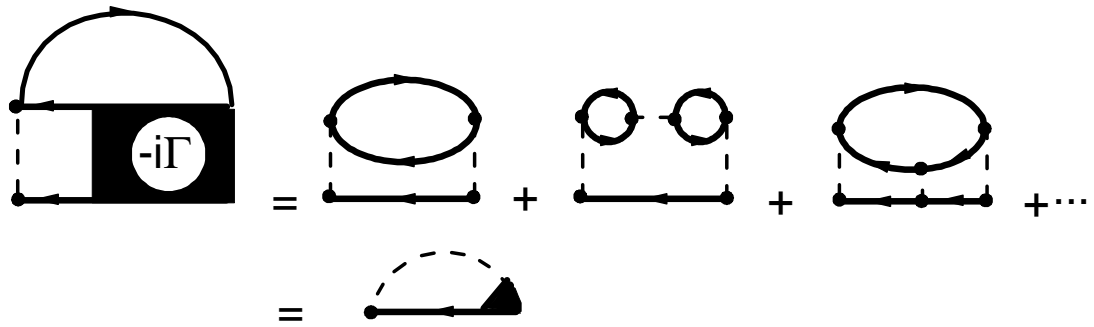


Рис. 2.26: Вершинная функция и перенормированное взаимодействие

рисунках для Σ и Γ имеем голую потенциальную линию: иначе определенные диаграммы были бы включены дважды. При всех операциях с диаграммами необходимо обращать внимание на исключение двойного суммирования.

Глава 3

Методы квантовой теории поля при конечных температурах

3.1 Аналитические свойства равновесных функций Грина

Формализм, который был развит к настоящему моменту, ограничивается свойствами многочастичных систем при нулевой температуре (т.е. в основном состоянии). Это связано с тем, что основное состояние является всегда невырожденным, так что можно было использовать адиабатическую гипотезу: если медленно включить взаимодействия, а затем медленно выключить, то это приведет лишь к появлению фазового множителя, который, так или иначе, сокращается. Это, в свою очередь, позволяет создать диаграммную технику.

Физически нельзя ограничиваться случаем $T = 0$. В принципе, усреднение в определении функции Грина могло быть выполнено по любому квантовому состоянию или набору состояний, и можно было бы определить её аналитические свойства, следуя тем же шагам, как при $T = 0$. Например, можно определить равновесные функции Грина при конечной температуре. Кроме того, оказывается, что существуют диаграммные техники, которые могут быть использованы для фактического вычисления таких функций Грина. В этой главе обсудим, почему и как это может быть сделано.

3.1.1 Статистический оператор (матрица плотности). Уравнение Лиувилля

Если квантовая система находится в каком-нибудь определённом квантовом состоянии, то говорят, что она находится в *чистом состоянии* $|\Phi\rangle$; в противном случае (т.е., когда квантовое состояние системы является известным только статистически) она находится в *смешанном состоянии* и описывается не отдельным вектором состояния, а *статистическим оператором*, $\hat{\rho}$:

$$\hat{\rho} = \sum_m |\Phi_m\rangle W_m \langle \Phi_m|. \quad (3.1)$$

Здесь W_m – вероятность нахождения системы в квантовом состоянии $|\Phi_m\rangle$; очевидно, что

$$\sum_m W_m = 1. \quad (3.2)$$

Состояния $|\Phi_m\rangle$ предполагаются нормированными, но не обязательно ортогональными. Статистический оператор позволяет находить среднее значение любого оператора A в этом смешанном состоянии:

$$\langle A \rangle \equiv \sum_m W_m \langle \Phi_m | A | \Phi_m \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} A).$$

В смешанном состоянии необходимо делать усреднение дважды: сначала по каждому составляющему квантовому состоянию, а затем по набору этих состояний с весами W_m ; след со статистическим оператором в вышеприведенной формуле учитывает оба этих случая. Подчеркнем, что реально оба усреднения происходят одновременно, невозможно отделить одно от другого. Равенство (3.2) гарантирует, что сумма вероятностей равна единице, т.е. унитарность.

Если мы выберем какой-нибудь ортонормированный базис, $\{|n\rangle\}$, тогда статистический оператор может быть переписан так:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \sum_n \sum_{n'} |n\rangle \rho_{nn'} \langle n'|, \\ \rho_{nn'} &= \sum_m W_m \langle n | \Phi_m \rangle \langle \Phi_m | n' \rangle. \end{aligned}$$

В этом виде статистический оператор (как набор матричных элементов $\{\rho_{nn'}\}$) часто называется *матрицей плотности*.

Диагональный элемент матрицы плотности, $\rho_{nn} \geq 0$, дает вероятность нахождения системы в состоянии $|n\rangle$, в то время как недиагональные члены описывают *квантовые корреляции* между разными состояниями.

Полезные свойства следа статистического оператора прямо следуют из его определения:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{\rho}) &= 1, \\ \text{Tr}(\hat{\rho}^2) &\leq [\text{Tr}(\hat{\rho})]^2. \end{aligned}$$

Равенство достигается тогда и только тогда, когда система находится в чистом состоянии. Первое равенство обеспечивает сохранение вероятности и прямо следует из (3.2): след матрицы (или оператора) есть инвариант при унитарных преобразованиях координат, а т.к. в одном специальном базисе он равен единице (3.2), то он будет равен единице при любом выборе набора базисных состояний.

Временная эволюция статистического оператора может быть определена, если написать его в виде (3.1) и вспомнить, что $|\Phi(t)\rangle = U(t) |\Phi(0)\rangle$:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_m |\Phi(t)\rangle W_m \langle \Phi(t)| = U(t) \hat{\rho}(0) U^\dagger(t).$$

Поэтому статистический оператор удовлетворяет квантовому уравнению Лиувилля (названному так потому, что оно является прямой аналогией классического уравнения Лиувилля для функции распределения):

$$i \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [H(t), \hat{\rho}(t)].$$

Заметим, что это уравнение в представлении Шредингера. Поэтому зависимость от времени гамильтониана (если она имеет место) может быть только явной, например, вследствие наличия переменного внешнего поля.

3.1.2 Определение и аналитические свойства равновесных функций Грина

Общие определения причинной, запаздывающей и опережающей одночастичных функций Грина,

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2) &= -i \operatorname{Tr} \left[\hat{\rho} T \psi_{\alpha}(\mathbf{x}_1, t_1) \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}_2, t_2) \right], \\ G_{\alpha\beta}^R(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2) &= -i \operatorname{Tr} \left[\hat{\rho} \left(\psi_{\alpha}(\mathbf{x}_1, t_1) \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}_2, t_2) \pm \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}_2, t_2) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}_1, t_1) \right) \right] \Theta(t_1 - t_2), \\ G_{\alpha\beta}^A(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2) &= +i \operatorname{Tr} \left[\hat{\rho} \left(\psi_{\alpha}(\mathbf{x}_1, t_1) \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}_2, t_2) \pm \psi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}_2, t_2) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}_1, t_1) \right) \right] \Theta(t_2 - t_1), \end{aligned} \quad (3.3)$$

являются, конечно, верными для равновесного состояния при конечной температуре, когда статистический оператор имеет стандартный вид большого канонического распределения Гиббса:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \exp[-\beta(H - \Omega)] \\ &= \sum_s \exp[-\beta(E_s - \mu N_s - \Omega)] |s\rangle \langle s| \\ &= \sum_s \rho_s |s\rangle \langle s|, \quad \beta = 1/T. \end{aligned}$$

Большая статистическая сумма есть

$$Z = \exp(-\beta\Omega) = \operatorname{Tr} [\exp(-\beta H)],$$

где Ω - большой термодинамический потенциал.

В изотропном однородном случае

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2) = \delta_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2, t_1 - t_2).$$

Теперь быстро повторим, внося необходимые изменения, вычисления, которые были проделаны при обсуждении аналитических свойств функций Грина при нулевой температуре.

Обобщённое представление Челлена-Лемана

Обобщённое представление Челлена-Лемана выводится таким же образом, как и при нулевой температуре (раздел 2.2), с той лишь разницей, что мы должны включить матричные элементы полевых операторов между всеми состояниями системы,

потому что теперь все возбуждённые состояния входят с ненулевым весом. В результате мы получаем для причинной функции Грина

$$\begin{aligned}
 G(\mathbf{p}, \omega) &= \left[\frac{1}{2} \right] (2\pi)^3 \sum_m \sum_n \rho_n A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_{mn}) \\
 &\times \left[\frac{1}{\omega - \omega_{mn} + i0} \pm \frac{\exp(-\beta\omega_{mn})}{\omega - \omega_{mn} - i0} \right], \\
 A_{mn} &= \left[\sum_{\alpha} \right] |\langle n | \psi_{\alpha} | m \rangle|^2, \quad \omega_{mn} = E_m - \mu N_m - (E_n - \mu N_n), \\
 \psi_{\alpha} &\equiv \psi_{\alpha}(0, 0), \quad \mathbf{P}_{mn} = \mathbf{P}_m - \mathbf{P}_n.
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Выделяя действительную и мнимую части (3.4) при вещественных частотах с использованием формулы Сохоцкого-Веерштрасса, находим

$$\begin{aligned}
 \operatorname{Re} G(\mathbf{p}, \omega) &= (2\pi)^3 \left[\frac{1}{2} \right] \operatorname{P} \sum_m \sum_n \rho_n A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_{mn}) \\
 &\times [1 \pm \exp(-\beta\omega_{mn})] \frac{1}{\omega - \omega_{mn}}, \\
 \operatorname{Im} G(\mathbf{p}, \omega) &= -\pi (2\pi)^3 \left[\frac{1}{2} \right] \sum_m \sum_n \rho_n A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_{mn}) \\
 &\times [1 \mp \exp(-\beta\omega_{mn})] \delta(\omega - \omega_{mn}).
 \end{aligned}$$

С другой стороны, для запаздывающей и опережающей функций Грина получаем тем же методом

$$\begin{aligned}
 G^{\mathrm{R}}(\mathbf{p}, \omega) &= \left[\frac{1}{2} \right] (2\pi)^3 \sum_m \sum_n \rho_n A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_{mn}) \frac{1 \pm \exp(-\beta\omega_{mn})}{\omega - \omega_{mn} + i0}, \\
 G^{\mathrm{A}}(\mathbf{p}, \omega) &= \left[\frac{1}{2} \right] (2\pi)^3 \sum_m \sum_n \rho_n A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_{mn}) \frac{1 \pm \exp(-\beta\omega_{mn})}{\omega - \omega_{mn} - i0}.
 \end{aligned}$$

В термодинамическом пределе ($N, V \rightarrow \infty, N/V = \text{const}$), обобщённое представление Челлена-Лемана более удобно использовать в континуальной форме:

$$G^{\mathrm{R}, \mathrm{A}}(\mathbf{p}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\rho^{\mathrm{R}, \mathrm{A}}(\mathbf{p}, \omega')}{\omega' - \omega \mp i0}, \tag{3.5}$$

где весовая функция (*спектральная плотность*) есть

$$\rho^{\mathrm{R}, \mathrm{A}}(\mathbf{p}, \omega') = -\pi \left[\frac{1}{2} \right] (2\pi)^3 \sum_m \sum_n \rho_n A_{mn} [1 \pm \exp(-\beta\omega_{mn})] \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_{mn}) \delta(\omega - \omega_{mn}).$$

Применяя еще раз формулу Сохоцкого-Веерштрасса, получаем

$$\begin{aligned}
 \operatorname{Re} G^{\mathrm{R}, \mathrm{A}}(\mathbf{p}, \omega) &= \operatorname{Re} G(\mathbf{p}, \omega), \\
 \operatorname{Im} G^{\mathrm{R}, \mathrm{A}}(\mathbf{p}, \omega) &= \pm \operatorname{Im} G(\mathbf{p}, \omega) \times \begin{cases} \coth(\beta\omega/2) - \text{статистика Ферми,} \\ \tanh(\beta\omega/2) - \text{статистика Бозе.} \end{cases}
 \end{aligned}$$

В пределе при $\beta \rightarrow \infty$ это, конечно, сводится к (2.11).

Таким образом, важное выражение для запаздывающей (опережающей) функции Грина через причинную функцию Грина при конечной температуре (для *действительных* частот) имеет вид:

$$G^{R,A}(\mathbf{p}, \omega) = \text{Re } G(\mathbf{p}, \omega) \pm i \text{Im } G(\mathbf{p}, \omega) \begin{cases} \coth(\beta\omega/2) & \text{- статистика Ферми,} \\ \tanh(\beta\omega/2) & \text{- статистика Бозе.} \end{cases} \quad (3.6)$$

Соотношение (3.6) позволяет находить $G^{R,A}(\mathbf{p}, \omega)$, если мы знаем $G(\mathbf{p}, \omega)$. Заметим, что последняя *не* является аналитической функцией, так что теперь возбуждения квазичастиц скорее определяются полюсами $G^{R,A}(\mathbf{p}, \omega)$ нижней (верхней) полуплоскости комплексной частоты, соответственно.

Это не удивляет, так как эти две функции Грина имеют прямой физический смысл. Они появляются, например, при вычислении кинетических параметров системы в теории линейного отклика. Для непосредственного нахождения $G^{R,A}(\mathbf{p}, \omega)$ нет регулярной теории возмущений, но есть стандартный способ для нахождения причинной функции Грина (так называемый *формализм Мацубары*), после которого запаздывающая и опережающая функции Грина могут быть прямо получены с помощью (3.6).

Всё ещё имеется защита от ошибок, которые могут быть вызваны неадекватными аппроксимациями: это соотношения Крамерса-Кронига, которые, конечно, остаются в силе при любой температуре (как сама причинность):

$$\text{Re } G^{R,A}(\mathbf{p}, \omega) = \pm P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } G^{R,A}(\mathbf{p}, \omega')}{\omega' - \omega},$$

а также асимптотическая формула

$$G(\mathbf{p}, \omega), G^{R,A}(\mathbf{p}, \omega)|_{|\omega| \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{\omega};$$

последняя, как ранее было показано, является результатом канонических коммутационных соотношений и сохранения вероятности.

Из соотношений Крамерса-Кронига и (3.5) следует, что для действительных частот спектральная плотность в термодинамическом пределе равна

$$\rho^R(\mathbf{p}, \omega) = \text{Im } G^R(\mathbf{p}, \omega) = -\frac{1}{2}\Gamma(\mathbf{p}, \omega).$$

Последняя функция, $\Gamma(\mathbf{p}, \omega)$, тоже часто называется спектральной плотностью, что, можно надеяться, не приведёт ни к какой путанице.

Правило сумм для запаздывающей функции Грина

Здесь есть ещё одна очень полезная защита: правило сумм для спектральной плотности $\Gamma(\mathbf{p}, \omega)$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \Gamma(\mathbf{p}, \omega) = 1.$$

Действительно,

$$\Gamma(\mathbf{p}, \omega) = \left[\frac{1}{2} \right] (2\pi)^4 \sum_m \sum_n \rho_n A_{mn} [1 \pm \exp(-\beta\omega_{mn})] \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_{mn}) \delta(\omega - \omega_{mn}), \quad (3.7)$$

можно проинтегрировать по частоте, а затем привести вычисления к каноническим коммутационным соотношениям между полевыми операторами тем же способом, как это было сделано при вычислении $\frac{1}{\omega}$ -асимптотики функций Грина.

Какой физический смысл этой формулы? $\Gamma(\mathbf{p}, \omega)$ даёт вероятность того, что квазичастица с энергией ω имеет импульс \mathbf{p} (или наоборот). Вследствие взаимодействий всегда имеется некоторый обмен импульсом и энергией между частицами и уширение пика $\delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu - \omega)$ невзаимодействующей системы. Так как квазичастица *должна* иметь некоторую энергию при заданном импульсе, интеграл (с соответствующей нормировкой) *должен* давать единицу.

Невозмущенные функции Грина

Невозмущенные функции Грина могут быть легко вычислены прямо из определения. Легче, однако, вычислять сначала запаздывающие и опережающие функции Грина, а затем получить причинную функцию Грина из (3.6):

$$G^{R,A(0)}(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{p}} + \mu \pm i0},$$

$$G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega) = P \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{p}} + \mu} - i\pi \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{p}} + \mu) \begin{cases} \tanh(\beta\omega/2) & \text{- статистика Ферми,} \\ \coth(\beta\omega/2) & \text{- статистика Бозе,} \end{cases}$$

в согласии с общими аналитическими свойствами.

Плотность частиц

Плотность частиц в импульсном пространстве (в расчёте на один спин) дается формулой

$$n_{\mathbf{p}} = \left[\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \right] \left\langle c_{\mathbf{p}[\alpha]}^{\dagger} c_{\mathbf{p}[\alpha]} \right\rangle.$$

Здесь $c_{\mathbf{p}[\alpha]}^{\dagger}, c_{\mathbf{p}[\alpha]}$ - фермиевские (бозевские) операторы рождения (уничтожения). Отметим также полезное соотношение

$$\left\langle c_{\mathbf{p}[\alpha]}^{\dagger} c_{\mathbf{p}'[\alpha']} \right\rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') [\delta_{\alpha\alpha'}] n_{\mathbf{p}}.$$

Далее можно написать

$$\begin{aligned} & (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') [\delta_{\alpha\alpha'}] n_{\mathbf{p}} \\ &= \left[\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \right] \sum_m \rho_m \langle m | \int d^3x \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{x}) \psi_{[\alpha]}^{\dagger}(\mathbf{x}) \int d^3x' \exp(-i\mathbf{p}'\mathbf{x}') \psi_{[\alpha']}(\mathbf{x}') | m \rangle, \end{aligned}$$

и

$$n_{\mathbf{p}} = \left[\frac{1}{2} \right] \sum_m \sum_n \rho_n A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_{mn}).$$

Сравнивая это выражение с (3.7), получаем

$$n_{\mathbf{p}} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \Gamma(\mathbf{p}, \omega) n_{\text{F,B}}(\omega),$$

где $n_{\text{F,B}}(\omega) = \frac{1}{\exp(\beta\omega) \pm 1}$ - распределение Ферми (Бозе). Полученное выражение имеет наглядный физический смысл: распределение Ферми (Бозе) определяет среднее число частиц с энергией при заданной температуре, в то время как спектральная плотность $\Gamma(\mathbf{p}, \omega)$ дает вероятность того, что частица с этой энергией имеет импульс \mathbf{p} .

3.2 Формализм Мацубáры

3.2.1 Уравнение Блóха

После рассмотрения аналитических свойств равновесных функций Грина при конечных температурах вновь встречаемся с трудным вопросом: как вычислять реальные функции Грина?

Все дело в том, что нельзя использовать напрямую результаты диаграммной техники при нулевой температуре. Причина в том, что теперь необходимо усреднять по всем возбуждѐнным состояниям системы, а не только по её основному состоянию. Основное состояние является невырожденным, а возбужденные состояния являются сильно вырожденными (бесконечно вырожденными в термодинамическом пределе). Поэтому метод, связанный с использованием адиабатической гипотезы, больше не работает: адиабатическое включение и выключение взаимодействия может оставить систему при $t \equiv +\infty$ в *любой* линейной комбинации возбуждѐнных состояний, сильно отличной от имеющейся при $t \equiv -\infty$, что зависит от взаимодействия, первоначального состояния и точного способа включения и выключения этого взаимодействия. Это, в свою очередь, означает, что нельзя выделить член $1/\langle S \rangle$, и целая схема терпит неудачу. Явным свидетельством этого факта является то, что причинная функция Грина является, по существу, неаналитической, и, таким образом, не может быть получена суммированием ряда.

Есть разные способы борьбы с этой трудностью. Во-первых, можно написать уравнение движения для функции Грина, затем расцепить функции Грина высших порядков и найти некоторое приближение (проверяя при этом, что удовлетворяются соотношения Крамерса-Кронига и т.д.). Недостаток здесь в том, что нет регулярной процедуры, и можно лишь надеяться на то, что догадка удачная.

Во-вторых, можно вычислить функцию Грина прямо по общей формуле (3.3) для среднего гейзенберговских операторов, $\langle n | T \psi \psi^\dagger | n \rangle = \langle n | S^{-1} T (\Psi \Psi^\dagger S) | n \rangle$. Имеется оригинальный способ для фактического достижения цели (*формализм Келдыша*, Келдыш Л.В. Диаграммная техника для неравновесных процессов // ЖЭТФ. — 1964. — Т. 47. — С. 1515—1527), его достоинство состоит в том, что он применим к любому неравновесному состоянию системы. Дополнительная сложность этого метода в том, что все функции Грина, собственные энергии и т.д. становятся матрицами 2×2 , что затрудняет вычисления. В равновесной ситуации можно выбрать кое-что более удобное.

В-третьих, можно использовать замечательную аналогию между оператором эволюции в обычном времени, $U(t) = \exp(-iHt)$, и (ненормированным) равновесным

статистическим оператором. Идея Мацубары заключается в использовании этой аналогии, с тем чтобы определить некоторые новые, мацубаровские, или температурные функции Грина, тесно связанные с обычными, причинными функциями Грина в реальном времени. Оказывается, что для температурных функций Грина могут быть разработаны простые и полезные диаграммы.

Если мы введём переменную τ , $0 < \tau < \beta$, то увидим, что $\hat{\rho}$ удовлетворяет *уравнению Блоха*,

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \hat{\rho}(\tau) = -H \hat{\rho}(\tau),$$

с начальным условием $\hat{\rho}(0) = I$. Если выполнить преобразование

$$t \leftrightarrow -i\tau,$$

то это уравнение превращается в уравнение Шредингера для $\hat{\rho}(it)$ на мнимом интервале $0 > t > -i\tau$:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(it) = H \hat{\rho}(it).$$

Статистический оператор является обобщением волновой функции, и неудивительно, что он удовлетворяет некоторому сорту уравнения Шредингера. Что немного удивляет, так это то, что в рисунок входит мнимое время; но это не является полностью экзотичным, потому что неотчетливо с подобной ситуацией сталкиваемся, например, в классической теории затухающего осциллятора, когда фигурируют мнимые частоты. Здесь более удобно повернуть ось времени в комплексной временной плоскости на $\pi/2$ (см. рис. 3.1).

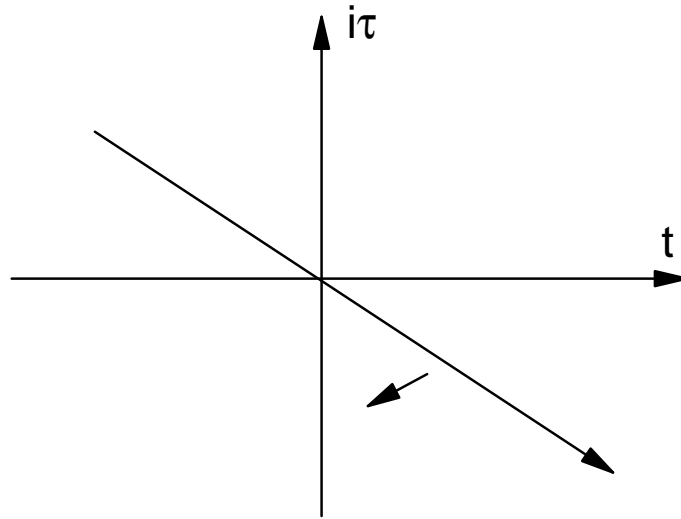


Рис. 3.1: Поворот Вика в комплексной временной плоскости

Этот, так называемый *поворот Вика*, преобразует операторы Гейзенберга в операторы Мацубары:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t) &= \exp(iHt) \psi(\mathbf{x}) \exp(-iHt) \rightarrow \psi^M(\mathbf{x}, \tau) = \exp(H\tau) \psi(\mathbf{x}) \exp(-H\tau), \\ \psi^\dagger(\mathbf{x}, t) &\rightarrow \psi^{\dagger M}(\mathbf{x}, \tau) = \exp(H\tau) \psi^\dagger(\mathbf{x}) \exp(-H\tau). \end{aligned}$$

Подчеркнём, что сопряжённый полевым оператор Мацубары не есть эрмитово сопряжённый полевым оператор Мацубары:

$$^{-M}(\mathbf{x}, \tau) \neq [{}^M(\mathbf{x}, \tau)]^\dagger.$$

Эти операторы удовлетворяют уравнениям движения, которые являются «аналитическим продолжением» гейзенберговских уравнений на мнимые времена:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \tau} {}^M(\mathbf{x}, \tau) &= [H, {}^M(\mathbf{x}, \tau)], \\ \frac{\partial}{\partial \tau} {}^{-M}(\mathbf{x}, \tau) &= [H, {}^{-M}(\mathbf{x}, \tau)].\end{aligned}$$

3.2.2 Температурные (мацубаровские) функции Грина

Теперь можно определить температурные функции Грина. Прежде всего, вводим *упорядочивающий по температуре* оператор T_τ , который, как обычно, упорядочивает операторы таким образом, что, чем больше аргумент τ , тем левее он стоит. Температурной функцией Грина является в таком случае, в прямой аналогии с (3.3):

$$\begin{aligned}G_{\alpha_1 \alpha_2}(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) &= -\langle T_\tau \psi_{\alpha_1}^M(\mathbf{x}_1, \tau_1) \bar{\psi}_{\alpha_2}^M(\mathbf{x}_2, \tau_2) \rangle \\ &= -\text{Tr} \left[\hat{\rho} T_\tau \psi_{\alpha_1}^M(\mathbf{x}_1, \tau_1) \bar{\psi}_{\alpha_2}^M(\mathbf{x}_2, \tau_2) \right].\end{aligned}$$

Как обычно, рассматривается однородное состояние без магнитного упорядочения, вследствие чего функция Грина зависит от $\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$, а зависимость от спина (если таковая имеется) сводится к $\delta_{\alpha_1 \alpha_2}$.

Исследуем аналитические свойства этой функции. Сначала покажем, что она зависит только от разности своих τ -аргументов:

$$G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau_1 - \tau_2).$$

Если, например, $\tau_1 > \tau_2$, то

$$\begin{aligned}&G(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) \\ &= -\text{Tr} \left\{ \exp[-\beta(H - \Omega)] T_\tau \psi_{\alpha_1}^M(\mathbf{x}_1, \tau_1) \bar{\psi}_{\alpha_2}^M(\mathbf{x}_2, \tau_2) \right\} \\ &= -\exp(\beta\Omega) \\ &\quad \times \text{Tr} \left\{ \exp(-\beta H) \exp(H\tau_1) \psi(\mathbf{x}_1) \exp(-H\tau_1) \exp(H\tau_2) \psi^\dagger(\mathbf{x}_2) \exp(-H\tau_2) \right\} \\ &= -\exp(\beta\Omega) \text{Tr} \left\{ \exp[-(\beta - \tau_1 + \tau_2)H] \psi(\mathbf{x}_1) \exp[-H(\tau_1 - \tau_2)] \psi^\dagger(\mathbf{x}_2) \right\},\end{aligned}$$

где использована инвариантность следа по отношению к циклическим перестановкам. Таким образом, температурная функция Грина зависит от переменной $\tau = \tau_1 - \tau_2$, которая изменяется от $-\beta$ до β , и может быть рассмотрена как периодическая функция с периодом 2β на всей действительной оси τ . Поэтому она может быть разложена в ряд Фурье:

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} G(\omega_n) \exp(-i\omega_n \tau), \quad (3.8)$$

где мацубаровские частоты

$$\omega_n = \frac{\pi n}{\beta}.$$

Теперь покажем, что ряд, зависящий от статистики рассматриваемых частиц, содержит или нечётные, или чётные мацубаровские частоты,

$$\begin{aligned}\omega_\nu^F &= \frac{(2\nu + 1)\pi}{\beta}, \\ \omega_\nu^B &= \frac{2\nu\pi}{\beta}.\end{aligned}$$

Чтобы увидеть это, возьмем некоторое $\tau < 0$ и вычислим $G(\tau)$ и $G(\tau + \beta)$:

$$\begin{aligned}G(\tau) &= \pm \text{Tr} \left\{ \exp[-\beta(H - \Omega)] \exp(H\tau) \psi \exp(-H\tau) \right\} \\ &= \pm \exp(\beta\Omega) \text{Tr} \left\{ \exp[-H(\tau + \beta)] \psi^\dagger \exp(H\tau) \right\}, \\ G(\tau + \beta) &= - \text{Tr} \left\{ \exp[-\beta(H - \Omega)] \exp[H(\tau + \beta)] \psi \exp[-H(\tau + \beta)] \psi^\dagger \right\} \\ &= - \exp(\beta\Omega) \text{Tr} \left\{ \exp(H\tau) \exp[-H(\tau + \beta)] \psi^\dagger \right\} \\ &= \mp G(\tau).\end{aligned}$$

Здесь вновь использована инвариантность следа по отношению к циклическим перестановкам. Верхний знак, как обычно, соответствует статистике Ферми-Дирака, а нижний - статистике Бозе-Эйнштейна. Таким образом, температурные функции Грина являются периодическими (для бозонов) или антипериодическими (для фермионов) с периодом β . Это означает, что в ряде (3.8) имеем только четные или нечетные мацубаровские частоты, потому что

$$\begin{aligned}\exp[-i\omega_\nu^F(\tau + \beta)] &= \exp(-i\omega_\nu^F\tau) \exp[-i(2\nu + 1)\pi] = -\exp(-i\omega_\nu^F\tau), \\ \exp[-i\omega_\nu^B(\tau + \beta)] &= \exp(-i\omega_\nu^B\tau) \exp[-i2\nu\pi] = \exp(-i\omega_\nu^F\tau).\end{aligned}$$

В заключение, разлагая $G(\mathbf{x}, \omega_n)$ в интеграл Фурье по импульсу, мы приходим к следующей форме:

$$G(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \exp[i(\mathbf{p}\mathbf{x} - \omega_\nu\tau)] G(\mathbf{p}, \omega_\nu),$$

с обратным преобразованием

$$G(\mathbf{p}, \omega_\nu) = \int_0^\beta d\tau \int d^3x \exp[-i(\mathbf{p}\mathbf{x} - \omega_\nu\tau)] G(\mathbf{x}, \tau).$$

Обобщенное представление Челлена-Лемана

Обобщённое представление Челлена-Лемана выводится таким же образом, как и ранее. Оно имеет вид:

$$G(\mathbf{p}, \omega_\nu) = \left[\frac{1}{2} \right] (2\pi)^3 \sum_m \sum_n \rho_n A_{mn} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{P}_{mn}) \left[\frac{1 \pm \exp(-\beta\omega_{mn})}{i\omega_\nu - \omega_{mn}} \right]. \quad (3.9)$$

Коэффициенты A_{mn} здесь те же, что входят в формулы для равновесных функций Грина с реальным временем, уравнение (3.4). Сравнение (3.9) с этим уравнением немедленно ведёт к соотношению между температурными функциями Грина и функциями Грина с реальным временем:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p}, \omega_\nu) &= G^R(\mathbf{p}, i\omega_\nu), & \omega_\nu > 0; \\ G(\mathbf{p}, \omega_\nu) &= G^A(\mathbf{p}, i\omega_\nu), & \omega_\nu < 0. \end{aligned}$$

Если известна температурная функция Грина, то можно найти функцию Грина с реальным временем простым аналитическим продолжением к мнимым частотам. Аналитическое продолжение является простым как понятие, но может оказаться довольно трудным в реальных вычислениях. С другой стороны, статистические свойства системы могут быть прямо получены из температурных функций Грина.

3.2.3 Диаграммная техника для температурных функций Грина

Представим гамильтониан системы в стандартной форме

$$H = H_0 + W.$$

Теперь оба члена должны быть независимыми от времени в представлении Шредингера; в противном случае не будет существовать равновесное состояние. "Мацубаровское представление взаимодействия" определяется в таком случае как

$$\Psi^M(\mathbf{x}, \tau) = \exp(H_0\tau) \psi(\mathbf{x}) \exp(-H_0\tau),$$

значит, «гейзенберговский» полевой оператор Мацубары равен

$$^M(\mathbf{x}, \tau) = \exp(H\tau) \exp(-H_0\tau) \Psi^M(\mathbf{x}, \tau) \exp(H_0\tau) \exp(-H\tau).$$

Повторяя, по существу, те же шаги, как и прежде, введем S -матрицу с мнимым временем в «представлении взаимодействия»:

$$S(\tau_1, \tau_2) = \exp(H_0\tau_1) \exp[-H(\tau_1 - \tau_2)] \exp(-H_0\tau_2). \quad (3.10)$$

Она удовлетворяет очевидным условиям:

$$\begin{aligned} S(\tau_2, \tau_1) &= S^{-1}(\tau_1, \tau_2), \\ S(\tau_1, \tau_3) S^{-1}(\tau_2, \tau_3) &= S(\tau_1, \tau_2). \end{aligned}$$

Можно также записать дифференциальное уравнение для $S(\tau, \tau_2)$:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} S(\tau, \tau_2) = -W(\tau) S(\tau, \tau_2).$$

где

$$W(\tau) = \exp(H_0\tau) W \exp(-H_0\tau).$$

Производя итерацию, находим аналогию разложению Дайсона для S , которая есть (для $\tau_1 > \tau_2$)

$$S(\tau_1, \tau_2) = T_\tau \exp \left[- \int_{\tau_2}^{\tau_1} d\tau W(\tau) \right].$$

Теперь получим основное выражение для G . Используя «мацубаровское представление взаимодействия» для полевых операторов Мацубары, находим, что температурная функция Грина может быть выражена через полевые операторы «взаимодействия», как это показано ниже:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau_1 - \tau_2) &= -\exp(\beta\Omega) \left\{ \text{Tr} \left[\exp(-\beta H) \exp(H\tau_1) \exp(-H_0\tau_1) \Psi^M(\tau_1) \exp(H_0\tau_1) \exp(-H\tau_1) \right. \right. \\ &\quad \times \exp(H\tau_2) \exp(-H_0\tau_2) \bar{\Psi}^M(\tau_2) \exp(H_0\tau_2) \exp(-H\tau_2) \left. \right] \Theta(\tau_1 - \tau_2) \\ &\quad \mp \text{Tr} \left[\exp(-\beta H) \exp(H\tau_2) \exp(-H_0\tau_2) \bar{\Psi}^M(\tau_2) \exp(H_0\tau_2) \exp(-H\tau_2) \right. \\ &\quad \times \exp(H\tau_1) \exp(-H_0\tau_1) \Psi^M(\tau_1) \exp(H_0\tau_1) \exp(-H\tau_1) \left. \right] \Theta(\tau_2 - \tau_1) \left. \right\}. \end{aligned}$$

Возьмем, например, первое слагаемое в этом уравнении. Используя определение (3.10), можно переписать его так

$$-\exp(\beta\Omega) \text{Tr} \left[\exp(-\beta H_0) S(\beta, \tau_1) \Psi^M(\tau_1) S(\tau_1, \tau_2) \bar{\Psi}^M(\tau_2) S(\tau_2, 0) \right] \Theta(\tau_1 - \tau_2).$$

Поэтому можно написать

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau_1 - \tau_2) &= -\exp(\beta\Omega) \text{Tr} \left[\exp(-\beta H_0) T_\tau S(\beta, 0) \Psi^M(\tau_1) \bar{\Psi}^M(\tau_2) \right] \\ &= -\exp[\beta(\Omega - \Omega_0)] \left\langle T_\tau S(\beta, 0) \Psi^M(\tau_1) \bar{\Psi}^M(\tau_2) \right\rangle_0. \end{aligned}$$

Здесь $\langle \dots \rangle_0$ есть усреднение с невозмущённым нормированным статистическим оператором $\exp[-\beta(H_0 - \Omega_0)]$. Множитель $\exp[\beta(\Omega - \Omega_0)]$ представим в виде

$$\begin{aligned} \exp[\beta(\Omega - \Omega_0)] &= \{\exp[\beta(\Omega_0 - \Omega)]\}^{-1} \\ &= \{\exp(\beta\Omega_0) \text{Tr}[\exp(-\beta H)]\}^{-1} \\ &= \{\text{Tr}[\exp(\beta(\Omega_0 - H_0)) S(\beta, 0)]\}^{-1} \\ &= \langle S(\beta, 0) \rangle_0^{-1}. \end{aligned}$$

Тогда выражение для G принимает вид, являющийся прямой аналогией формулы для гриновской функции при нулевой температуре:

$$G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \tau_1 - \tau_2) = - \frac{\left\langle T_\tau S(\beta, 0) \Psi^M(\tau_1) \bar{\Psi}^M(\tau_2) \right\rangle_0}{\langle S(\beta, 0) \rangle_0}.$$

Эта формула дает основу для мацубаровской диаграммной техники. Мы опять раскладываем S -матрицу в ряд по взаимодействию и выражаем члены как средние по невозмущённому основному состоянию. Теоремы Вика и сокращения являются все еще верными в этом случае. Можно проверить, что, например, «термодинамическое» доказательство теоремы Вика остаётся в силе после замены $it \rightarrow \tau$. Поэтому можно

Координатное представление		
	$-G(X, X')$ $= -G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau - \tau')$	Температурная функция Грина (ТФГ)
	$-G^0(X, X')$ $= -G^0_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \tau - \tau')$	Невозмущенная ТФГ
	$-U(1-2) = -U(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$ $\cdot \delta(\tau_1 - \tau_2) \delta_{\alpha_1 \alpha_2}$	Потенциал взаимодействия
	$n^0(\mathbf{x})$	Невозмущенная электронная плотность
Импульсное представление		
	$-G(\mathbf{p}, \omega_v)$	ТФГ
	$-G^0(\mathbf{p}, \omega_v)$	Невозмущенная ТФГ
	$-U(\mathbf{p})$	Потенциал вз-я
	$n^0(\mu)$	Невозмущенная электронная плотность

Рис. 3.2: Правила Фейнмана для температурной функции Грина (скалярное электрон-электронное взаимодействие): *координатное представление* - предполагается интегрирование по всем промежуточным координатам и "временам" (по τ от 0 до β) и суммирование по скрытым спиновым индексам, *импульсное представление* - предполагается интегрирование по всем промежуточным импульсам и суммирование по дискретным частотам $\frac{1}{\beta} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty}$ и по скрытым спиновым индексам, принимая во внимание сохранение энергии (частоты) и импульса в каждой вершине

представить члены в виде фейнмановских диаграмм; все несвязные диаграммы сокращаются, и остаются обычные, связные диаграммы. Правила даны в таблице (см. рис. 3.2).

Единственным различием является то, что в фурье-представлении вместо интегрирования в вершинах по промежуточным частотам от минус до плюс бесконечности проводится суммирование по дискретному набору мацубаровских частот. Суммирование, как правило, является более трудным, чем интегрирование, однако имеется много полезных приемов. Приведем здесь самые основные приемы, которых в большинстве случаев достаточно для вычислений.

Суммирование по частотам

Если функция комплексной переменной z удовлетворяет условию $f(z) \sim |z|^{-(1+\varepsilon)}$, при $|z| \mapsto \infty$ и бесконечно малой величине $\varepsilon > 0$, то справедливы следующие тождества:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} f(i\omega_{\nu}^F) = -\frac{1}{2} \sum_s \tanh(\beta z_s/2) \operatorname{Res}_{z=z_s} f(z) \quad \text{фермионы,} \quad (3.11)$$

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} f(i\omega_{\nu}^B) = -\frac{1}{2} \sum_s \coth(\beta z_s/2) \operatorname{Res}_{z=z_s} f(z) \quad \text{бозоны.} \quad (3.12)$$

Происхождение этих формул станет ясным, если вспомнить, что функция комплексной переменной z , $\tanh(\beta z/2) = \frac{\exp(\beta z)-1}{\exp(\beta z)+1}$, имеет полюсы как раз в точках $z_{\nu} = \frac{i(2\nu+1)\pi}{\beta} = i\omega_{\nu}^F$, и её вычет в любой из этих точек равен $2/\beta$. Контурный интеграл $\oint dz f(z) \tanh(\beta z/2)$ вдоль бесконечно большой окружности на рис. 3.3 стремится к нулю (это обеспечивается условием того, что $f(z)$ стремится к нулю быстрее, чем $1/|z|$ на бесконечности). С другой стороны, по теореме Коши, интеграл пропорцио-

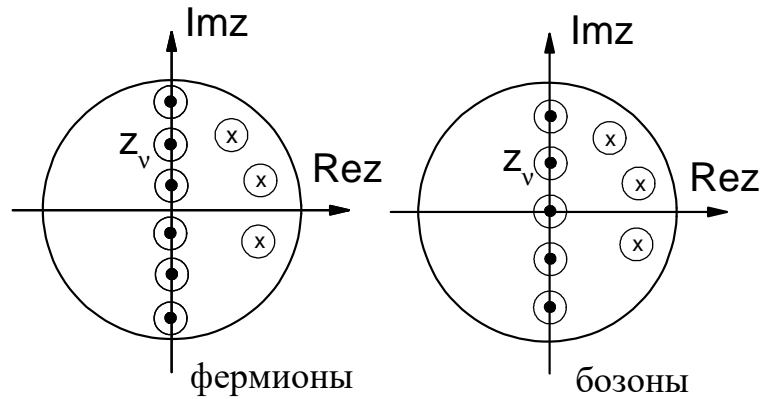


Рис. 3.3: Прием с интегрированием

нален сумме вычетов подынтегрального выражения; вычеты гиперболического тангенса \tanh дают левую сторону (3.11), в то время как остальное даёт её правую сторону. Те же рассуждения ведут к (3.12), если вместо $\tanh(\beta z/2)$ будем использовать $\coth(\beta z/2)$. Так как $\tanh(\beta z/2) = \frac{n_B(z)}{n_F(z)}$, то видно, что равновесные функции распределения естественно входят в вычисления с этой на вид формальной стороны.

Глава 4

Литература

1. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. — М.: Добросвет, КДУ, 2006. — 512 с.
2. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния. — М.: Наука, 1978. — 448 с.
3. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979. — 528 с.
4. Каданов Л., Бейм Г. Квантовая статистическая механика. Методы функций Грина в теории равновесных и неравновесных процессов. — М.: Мир, 1964. — 255 с.
5. Mahan G.D. Many-particle physics (third edition). — New York: Kluwer Academic/Plenum Publisher, 2000. — 785 p.
6. Zagoskin A.M. Quantum theory of many-body systems: techniques and applications (second edition). — Heidelberg-New York-London: Springer, 2014. — 280 p.
7. Маттук Р. Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел. — М.: Мир, 1969. — 368 с.
8. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика (в двух томах). — М.: Мир, 1978. (Т. 1. — 405 с., Т. 2. — 399 с.).

Демин Рафаэль Гарунович
Кочелаев Борис Иванович
Тагиров Ленар Рафгатович

**МЕТОДЫ
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ
В ФИЗИКЕ
КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ**

КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ

2018